

筑波大学計算科学研究センター 平成23年度 年次報告書

雑誌名	筑波大学計算科学研究センター 平成23年度 年次報告書
発行年	2012-06
URL	http://hdl.handle.net/2241/00150222

内容

1. 平成 23 年度 重点施策・改善目標.....	2
1-1. 重点施策.....	2
1-2. 改善目標.....	4
2. 平成 23 年度実施報告.....	5
2-1. 平成 23 年度計画並びに改善目標に記載されている事項についての達成状況等	5
2-2. 自己評価と課題.....	9
3. 各研究部門の報告.....	11
I. 素粒子物理研究部門	11
II. 宇宙・原子核物理研究部門	26
II-1. 宇宙分野	26
II-2. 原子核分野	44
III. 量子物性研究部門	59
IV. 生命科学研究部門	77
IV-1 生命機能情報分野.....	77
IV-2. 分子進化分野	86
V. 地球環境研究部門	93
VI. 高性能計算システム研究部門.....	105
VII. 計算情報学研究部門	116
VII-1. データ基盤分野	116
VII-2. 計算メディア分野.....	128

1. 平成 23 年度 重点施策・改善目標

1-1. 重点施策

「第 2 期中期計画に関わる大学全体の年次別実行計画」の重点施策は、以下のとおり：

22-1「各研究科や研究センターの研究戦略・企画組織を充実・強化し、当該組織の学問分野における特色を生かしつつ、長期的展望に立つ基礎研究と学際融合的な研究を計画的に推進する。」

平成 23 年度重点施策：各研究科・研究センターの学問分野における特色を生かしつつ、長期的な展望に立った基礎研究と学際融合的な研究を計画的に遂行

32-1「共同利用・共同研究拠点は重点戦略経費等により支援する。各拠点は第二期中期目標・中期計画期間中の目標と計画を定め、期間中に評価を実施して実施状況の検証を行いつつ高い研究成果の実現を図る。」

平成 23 年度重点施策：学際共同研究プログラムを実施し、共同研究を推進する。学際計算科学の最先端を開拓する重点研究開発を実施する。国際的な研究連携および次世代スパコンとの連携については、具体的な活動を行う。

【研究】

(1) 学際計算科学のアプローチにより、エクサスケール計算の礎となる、計算基盤の能力および機能の飛躍的な向上のための計算技術開発と計算科学の革新に取り組むプロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」を確実に推進する研究開発体制を構築し、研究開発を実施する。

(2) 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動として、特別経費プロジェクト「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業」とともに、学際共同研究プログラムを実施し、学際計算科学の共同研究を実施することにより、計算科学の研究を推進する。

(3) KEK、国立天文台とともに運営する計算基礎科学連携拠点において、HPCI 戦略プログラム（分野 5、計算基礎科学）を実施する。また、理化学研究所、次世代スパコン開発実施本部ならびに「計算科学研究機構」と連携し、国の「京」コンピュータにおける最先端計算科学の推進に貢献する。我が国の計算資源の有効利用を図る HPCI コンソーシアムに参画し、我が国の計算科学の基盤構築に寄与する。

(4) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図った。各部門の目標は次のとおりである。

素粒子物理研究部門：物理的なクォーク質量でのゲージ配位を使ったいろいろな物理量の計算を行う。ハドロン間相互作用の研究をさらに進める。有限温度有限密度相転移のクォーク質量依存性の研究を進める。

宇宙・原子核物理研究部門：宇宙の初代天体から銀河・銀河団形成に至る宇宙進化を、大規模な輻射流体力学、N体シミュレーションによって探究する。密度汎関数理論に基づく量子ダイナミクス計算により、原子核や物質と光の相互作用を解明する。

量子物性研究部門：大規模並列計算によりナノ構造体の持つ特徴的物性の解明、次世代半導体技術基盤の創成等の研究を行う。当該年度ではつくばナノテクアリーナに参画している産業界にも貢献する計算科学の知見を得る。

生命科学研究部門：酵素や超分子システムの機能発現機構を分子および電子構造のレベルから明らかにするため、転写制御システムに関する生命情報科学的な解析を進める。真核生物の起源と初期進化を解明するために真核生物系統樹の大規模解析を行うとともに、大規模解析の問題点を明らかにしその解決策を探る。

地球環境研究部門：大気大循環モデル NICAM を用いた北極低気圧のライフサイクルの研究と北極温暖化における海水と大気の相互作用の研究を行う。領域気象モデル WRF を用いた都市気候の研究を実施する。

高性能計算システム研究部門：アプリケーションの大規模並列化や次世代並列言語の実応用への適用と GPU 適応化を通じ、各応用分野との学際的共同研究を展開。新規開発予定の HA-PACS における実証実験を進める。

計算情報学研究部門：大規模計算に関わるデータ基盤整備を進めると共に、大規模実時間実世界データの利活用を進める。大量情報の提示方式、人介在型の高精度データ解析の実装を通じて計算メディアの有効性を検討。

【国際】

国際拠点の確立を目指して、国際連携として、エジンバラ大学および、米国のローレンスバークレイ研究所との連携を進める。また、アジアにおいては韓国 KISTI との連携を検討する。

【教育】

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、計算科学に関する大学院共通科目を実

施。計算科学のデュアルディグリー・プログラムを研究科とともに実施。また、グローバル 30 の計算科学の講義の英語化を実施。

1-2. 改善目標

外部評価において指摘された計算機開発により最先端の計算科学を推進する「学際計算科学」の推進体制については、概算要求プロジェクトおよび HPCI 戦略プログラム等で確実に推進されつつあるが、それを支える事務体制の構築・充実が喫緊の課題になっている。

2. 平成 23 年度実施報告

2-1. 平成 23 年度計画並びに改善目標に記載されている事項についての達成状況等

共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、センターの主要計算設備を活用する学際共同プログラムを実施した。当該年度においては、31 課題のプロジェクトを採択、実施し、25 件の旅費支援、2 件の集会支援を行った。長期的な基礎研究を含む、各研究グループが行う重点課題についても、この学際共同プログラムのプロジェクトとして実施し、研究を着実に進めている。

学際計算科学の最先端を開拓する、特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」について、計算科学推進室と次世代計算システム開発室を設置し、確実に推進する研究開発体制を構築し、進めている。本プロジェクトを推進するためのシステムとして HA-PACS システムを調達し、2 月から運用を開始した。

国際的な連携として、エジンバラ大学とローレンスバークレイ研究所とワークショップを開催し、交流を進めるとともに、国内においては、KEK、国立天文台とともに計算基礎科学分野の HPCI 戦略プログラム分野 5 を推進した。さらに、理研と共同で、本センターが中心になって開発した実空間汎密度関数法プログラム RS-DFT による研究成果について、ゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞した。また「京」を中心として我が国のスパコンを連携させる HPCI システムの構築においては広域のストレージを担当し、HPCI の構築に貢献した。

〔重点施策の達成状況〕

【研究】

(1) 当該プロジェクトを実施する体制として、計算科学推進室と次世代計算システム開発室を設置した。計算科学推進室においては、エクサスケール計算を見据えた次世代の計算科学プログラムを開発する。次世代計算システム開発室においては、演算加速機構を直接結合するインタコネクトを中心とする計算機システムアーキテクチャの研究を行う。当該年度においては、プロジェクトを推進するためのシステムとして HA-PACS システムを調達し、2 月から運用を開始した。

(2) 共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、センターの主要計算設備である、T2k-tsukuba、PACS-CS、FIRST を利用する学際共同プログラムを実施し、学際計算科学の研究を推進した。当該年度においては、31 課題のプロジェクトを採択、実施した。25 件の旅費支援、2 件の集会支援を行った。なお、PACS-CS システムについては、震災による省電力の要請に対し、5 月から夜間のみの運転し、9 月末をもって、稼働を終了した。

その総括と次の展開を議論する、第 2 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム—PACS-CS による計算科学の発展と次世代コンピューティングへの展開—を 9 月に開催した。

(3) KEK、国立天文台と締結した計算基礎科学連携拠点を運営し、これを中心として計算基礎科学分野の次世代スパコンの戦略プログラム（分野 5）を推進した。次世代スーパーコンピュータ開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定」に基づき、本センターが中心になって開発した実空間汎密度関数法プログラム RS-DFT や格子 QCD などのプログラムを「京」コンピュータで高度利用ための共同研究を推進した。

当該年度においては、RS-DFT による研究成果について、「京」を用いた研究成果を、ハイ・パフォーマンス・コンピューティング（高性能計算技術）に関する国際会議 SC11（米国・シアトル開催）で発表し、ゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞した。また、この研究の中で行った高速 FFT についても HPC チャレンジベンチマークで 1 位になった。また、HPCI システムの構築においては広域のストレージを担当し、分散ファイルシステム Gfarm を用いた我が国の計算資源の有効利用を図る HPCI の共有ファイルシステムを構築した。また、これを維持運営する HPCI コンソーシアムに参加することになった。

(4) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図った。当該年度においては、受託研究・共同研究等 19 件、科研費（分担を含む）41 件、補助金 2 件、金額ベースで外部資金 902 百万円（うち、493 百万円は戦略プログラム、H22 年度 457 百万円）である。

各部門の達成状況は次のとおりである。

素粒子物理研究部門：物理的なクォーク質量のゲージ配位を用いて、アップクォークとダウンクォークの質量差及び電磁相互作用の効果を取り入れたハドロン質量の計算を行い、その結果と実験値との比較から、クォーク質量を精密に決定した。バリオン間ポテンシャルを効率よく精密に決定する方法を開発し、核子の散乱位相の計算を行った。また、フレーバーSU(3)対称な格子 QCD 計算を大きな体積で行い、H ダイバリオンが束縛状態として存在することを示すとともに、束縛エネルギーを決定した。クォーク質量が重い場合に、有限温度有限密度の相転移点の質量依存性を決定した。

宇宙・原子核物理研究部門：宇宙の初代天体から銀河・銀河団形成に至る宇宙進化ならびに近傍宇宙における銀河考古学を、大規模な輻射流体力学、N 体シミュレーションによって探究した。時間依存密度汎関数理論に基づき、光と物質の相互作用を第一原理から記述するマルチスケール・シミュレーション法を開発し、また量子ダイナミクス計算により原

子核の励起と反応を記述する理論を進展させた。

量子物性研究部門：RSDFT を「京」にチューニングしてシリコンナノワイヤーの大規模第一原理計算を行なった。また、次世代メモリである抵抗変化型メモリの動作機構の電子レベルでの解明等、つくばナノテクアリーナ参画している産業界に貢献するナノサイエンスの知見を計算科学によって獲得する方策について検討した。

生命科学研究部門：近年立体構造が初めて決まり、現在極めて注目されている生体酵素、一酸化窒素還元酵素と DNA-トポイソメラーゼ、の反応機構について理論的解明を行った。高精度計算手法（QM/MM 法）を用いた反応中間体構造や遷移エネルギーの決定により、活性中心近傍のアミノ酸が反応に重要な役割をしていることを明らかにした。また、アラニンやバリンなど宇宙空間でも存在するアミノ酸に対して、D 体 L 体の存在比の偏りが発生するプロセスについて理論的研究を行った。

真核生物大系統で最近の議論の焦点の一つであるハプト・クリプト生物群、真核生物系統の根元（起源）にかかわる可能性の高いディスコバ生物群の研究を遂行した。ハプト・クリプト生物群である可能性のある新奇真核微生物 *Palpitomonas bilix*、およびディスコバ生物群の *Tsukubamonas globosa* の網羅的発現遺伝子解析を行った。この配列データをもとに 159 遺伝子データセット整備し、現在大規模系統解析にむけて準備中である。

地球環境研究部門：近年の北極圏の温暖化の研究は、地球温暖化研究における最前線に位置づけられている。北極圏の海氷激減の要因としてボーフォート高気圧と対をなす北極低気圧が海氷を駆動し、海氷の激減の要因となっていることから、大気大循環モデル NICAM を用いた北極低気圧のライフサイクルの研究と北極温暖化における海氷と大気の相互作用の研究を推進した。建物解像 LES モデルを計算機科学分野との共同で開発した。多治見市と CCS との協定に基づき、多治見猛暑の実態調査を行った。領域気象モデル WRF を用いた温暖化ダウンスケーラーを開発し、都市気候の将来予測の研究を実施した。

高性能計算システム研究部門：次世代並列言語 XMP の仕様確定とコンパイラ開発、大規模 GPU クラスタ向け拡張を実施した。HA-PACS の密結合演算加速機構のプロトタイプを FPGA で実装し、実証実験を開始した。広域分散ファイルシステム Gfarm の HPCI における大規模共有ファイルシステムとしての実運用の設計と、さらに高度なコピー作成・耐故障機能を開発した。各種並列数値アルゴリズムの高速化を行い、特に「京」コンピュータにおける実アプリケーション高速化を実現した。

計算情報学研究部門：データマイニング、XML 等に関わるデータ基盤技術や、実時間ストリームデータ基盤技術に関する研究をこれまでの研究成果を発展させるべく展開した他、

気象データ、QCD データ、衛星センサデータ等に関する技術の高度化を他部門と連携して推進した。また、映像・画像メディアにおいてデータ解析を効率よく行えるインタフェースの方法論を構築してきた。特に、スポーツシーンでの視点誘導、屋外映像の利活用、ユーザの協調的介在による解析精度の向上、などの研究により、計算メディアの有効性を検証した。

【国際】

国際連携として、エジンバラ大学については、エジンバラ大学並列処理センター(EPCC)と、エジンバラにて 3 回目のシンポジウムを行い、エクサスケール計算技術について議論した。米国のローレンスバークレイ研究所については、2 回目のワークショップを行い、共同研究の課題について議論した。また、アジア地域の連携については韓国のスパコンセンターである KISTI において、高性能計算技術についてのウインタースクールを開催し、人材育成・研究について連携していくことになった。

【教育】

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、本年度も計算科学に関する大学院共通科目を実施した。計算科学のデュアルディグリー・プログラムを研究科については、これまでの数理物質研究科に加え、生命環境研究科ともプログラムを実施することとし入試を開始した。今年度末には 1 名が修士課程を修了した。また、計算科学教育の国際化に向けて、グローバル 30 の計算科学の講義の英語化を行った。

〔改善目標の達成状況〕

センターの充実、T2k-tsukuba システムに加えて、新 HA-PACS システムの運用開始、次世代スパコン戦略プログラムの実施に伴い、研究企画・財務・総務広報等のそれぞれの面で検討事項・処理事項と事務量が大幅に増大した。特に、次世代スパコン戦略プログラムについてはセンター事務とは別に事務組織を立ち上げ運営している。また、「共同利用・共同研究拠点形成強化事業」の支援により、計算機システムの運営のための人員 1 名を雇用して改善を図っている。しかし、依然として事務体制の人員は不足しており、改善する必要がある。

〔その他特色ある取組の実施状況〕

(1) HA-PACS システム（ベースクラスタ）の調達・運用

概算要求プロジェクトで開発する HA-PACS システムのベースクラスタシステムは、PACS-CS システムのフロントエンドシステム(FCS)の予算を流用して調達することとし、この部分を学内負担としている。当該年度においては、このベースクラスタシステム HA-PACS(800TF の性能)についての調達し、2 月から運用を開始している。来年度に向け

では、学際共同利用プログラムによる共同利用を検討する予定である。

(2) 分野・部門間の連携研究の推進

当センターでは、科学諸分野と計算機科学・情報科学の連携・協働による「学際計算科学」を中心的なコンセプトとして研究活動を行っている。素粒子分野と超高速計算システム分野、地球環境分野と計算知能分野などが具体的な研究課題についてワーキンググループを設置して定期開催を行い、共同研究を進めている。これを核にして、エクサスケールの計算科学を目指した特別経費プロジェクトを進めるとともに、外部資金の獲得についても取り組んでいる。

(3) 他のスパコンセンター等、関連組織との連携の推進

これまで、T2K-tsukuba システムの導入を機会に、東京大学、京都大学との連携を推進している。当該年度においては、この e-science プロジェクトの実用化・加速に向けて、最先端基盤整備事業を実施した。また、スパコンセンター間では HPCI 構築のためのセンター間の共同作業を行った。来年度においては、実際に運用を行う予定となっている。

2-2. 自己評価と課題

(1) 自己評価

特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」の初年度であり、研究を着実に進めるための体制の構築をするとともに、プロジェクトを推進するための計算機システム HA-PACS の調達を行うなど、着実にスタートした。また、学際共同利用プログラムについても、着実に進捗している。当該年度においては、震災後の計算機運用再開の作業をスムーズに進め、省電力運転を行い昨年夏の省電力に貢献した。

次世代スパコンに関して理研と共同研究を行ってきたが、本センターが貢献してきた RS-DFT や FFT について、世界的な賞を獲得し、その成果が実ったといえる。今後、本センターが中心となって基礎科学の分野の戦略プログラムの運営を鋭意進めるとともに、スパコン連携基盤である HPCI の運営にも協力していきたい。

(2) 課題

① 次世代スパコン、全国的な計算科学コミュニティの中の位置づけの確保

これまでと比べて飛躍的な計算能力を持つ次世代スパコン「京」が稼動し、その運営組織として計算科学研究機構が設立されるなど、我が国の計算科学の体制が変化する中で、当センターがこれまで以上に存在感を発揮し、全国の大学の中で唯一の計算科学の共同利用・共同研究拠点として、最先端の計算科学をリードしていく体制と戦略が急務である。このなかで、T2K の次のシステムについて、つぎの最先端システムの検討・調達と革新的

な技術開発への戦略を練っていく必要がある。

② 省電力への取り組み、予算面での課題

震災後の電力事情の変化により、電気料金の高騰が予想されている。電気料金は本センターの予算の大きな部分を占める部分であり、高騰した場合の対処を検討しておく必要がある。また、外部資金の間接経費の配分方式は、全学的な研究システムの整備の中で、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

3. 各研究部門の報告

I. 素粒子物理研究部門

1. メンバ

教授 青木 慎也、宇川 彰(計算科学研究センターフェロー)、金谷 和至(共同研究員)

准教授 石塚 成人、蔵増 嘉伸、吉江 友照、石井 理修、根村 英克

講師 谷口 裕介

研究員 浮田 尚哉、Nguyen Hoang Oanh、佐々木健志、滑川 裕介

2. 概要

当部門では、本年度も、格子 QCD の大型シミュレーション研究の分野で活発な研究活動が行われた。当部門の研究者の大部分は、2006 年 7 月の計算科学研究センターの次期並列計算機として PACS-CS が導入されたのを契機として新たに立ち上げられた研究グループ PACS-CS Collaboration に参加している。PACS-CS Collaboration では、当センターの PACS-CS や T2K-Tsukuba を主要計算機資源として、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことを目的として、3 種類(up, down, strange)の軽いクォークをその物理的質量(物理点)において動的に扱う $N_f=2+1$ QCD の大規模シミュレーションを進めた。今年度は特に、up, down 間の質量差や電磁相互作用を取り入れる $N_f=1+1+1$ QCD の研究や、格子 QCD による He 原子核の研究などを推進し、物理的な結果を得るに至った。これらと並行して、核子間ポテンシャルの研究、ハドロン間相互作用の研究、核子形状因子の研究、有限温度・有限密度 QCD の研究、や、計算技術開発なども行った。さらに、格子 QCD 配位やその他のデータを共有する為のデータグリッド ILDG/JLDG の構築・整備を推進した。

次世代スーパーコンピュータ「京」を中核とした革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築を主導するために、「High Performance Computing Infrastructure(HPCI)戦略プログラム」が文部科学省により推進されている。HPCI 戦略プログラムの 5 つの戦略分野の 1 つとして、青木が統括責任者を務める、分野 5「物質と宇宙の起源と構造」が採択され、2010 年度から準備研究を行い、2011 年度は本格的な研究を開始した。分野 5 の戦略プログラムを実施する機関は、青木が拠点長を勤める「計算基礎科学連携拠点」(<http://www.jicfus.jp/jp/>)である。分野 5 の活動に関しては、<http://www.jicfus.jp/field5/jp/> を参照のこと。また、「京」を用いて計算機科学と計算科学分野の連携・融合を促す国際的な研究拠点として、神戸に計算科学研究機構(AICS)が設立され、2010 年度から蔵増が計算科学研究機構の主任研究員を兼任している。

3. 研究成果

【1】PACS-CS Collaboration の活動(全員)

当センターでは、平成 17 年度から 3 ヶ年計画で特別教育研究経費(拠点形成)を受けて開発・製作が進められてきた超並列クラスタ計算機 PACS-CS(計算ノード数 2560、ピーク演算性能 14.3Tflops)が平成 18 年 7 月から稼働を開始した。PACS-CS Collaboration は PACS-CS を主要な計算設備として格

子 QCD の研究を行うことを目的とし、筑波大学物理学系メンバを中心として組織されている。その目標は、domain-decomposed HMC (DDHMC) アルゴリズムと polynomial HMC (PHMC) アルゴリズムを組み合わせることによって 3 種類 (up, down, strange) の軽いクォークをその物理的質量 (物理点) において動的に扱うシミュレーションを行い、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことである。平成 18、19 年度は物理点へ向けて up-down クォーク質量を段階的に軽くすることによって物理量のクォーク質量依存性を調べるのが主要課題であった。平成 20 年度より PACS-CS プロジェクトの目標である物理点でのシミュレーションへの取り組みを開始し、平成 21 年度 reweighting 法を用いた物理点直上でのシミュレーションに成功した。次のステップとして、平成 22 年度からは 1+1+1 フレーバー QCD+QED シミュレーションの開発と物理点における体積効果の検証を開始した。

なお、PACS-CS は平成 23 年 9 月末をもって運用を終了し、平成 24 年 2 月より後継機となる密結合並列演算加速機構実証システム HA-PACS (計算ノード数 268、GPU 部ピーク演算性能 713Tflops、CPU 部ピーク演算性能 89Tflops) が稼働を開始した。

(1) 1+1+1 フレーバー QCD+QED シミュレーションの開発と物理点における体積効果の検証 (蔵増、浮田、滑川)

従来の格子 QCD 計算では、アルゴリズム的理由により up と down クォークの質量は人為的に等しくし (2+1 フレーバー)、電磁相互作用の効果も無視していた。これに対して、1+1+1 フレーバー QCD+QED シミュレーションでは自然界を再現すべく up, down, strange クォークの質量をすべて独立なものとして扱い、電磁相互作用の効果も同時に評価することを目指している。電磁相互作用および up と down クォークの質量差は reweighting 法によって取り入れている。本格計算は $32^3 \times 64$ の格子サイズを用いて行われ、up クォーク質量、down クォーク質量、strange クォーク質量、格子間隔を決定するための 4 つの物理インプットとして π^+ メソン、 K^0 メソン、 K^+ メソン、 Ω バリオンを採用した。これにより、up と down クォークの質量差を直接定量的に評価することが可能となった。現在計算は終了し、論文を準備中である。

物理点における体積効果検証に関しては、超並列クラスタ計算機 T2K-Tsukuba (計算ノード数 648、ピーク演算性能 94Tflops、平成 20 年 6 月稼働開始) を利用して 64^4 の格子サイズを用いた 2+1 フレーバー QCD シミュレーションを実行中である。本年度は reweighting 法を用いた物理点へのチューニングが主な課題であった。図 1 はハドロン質量の実験値との比較を表している。ここでは、up-down クォーク質量、strange クォーク質量、格子間隔を決定するための 3 つの物理インプットとして、 π メソン、 K メソン、 Ω バリオンの質量を用いており、黒丸がオリジナルなシミュレーション結果、青丸はチューニング後の物理インプット、赤丸はそれ以外のハドロン質量を表している。青丸で表された結果から、reweighting 法を用いたクォーク質量の物理点へのチューニングが適切になされていることがわかる。チューニング後も ρ メソン質量と Δ バリオン質量の実験値からのズレが他のハドロンに比べて顕著であるが、それらは実験的には共鳴状態であることが知られており、その効果は図中の結果には取り入れられていない。その他のハドロンに関しては、実験値とのズレは最大で数%程度である。

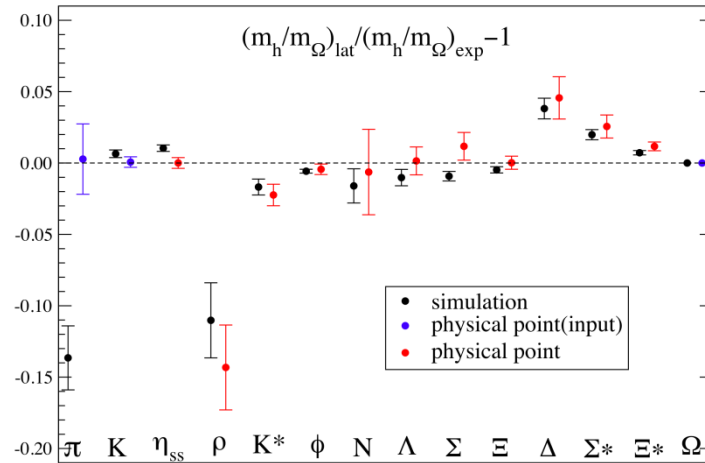


図1 ハドロン質量の実験値との比較

Ω バリオンの質量で規格化されている。黒丸、青丸、赤丸に関しては本文を参照。

(2) 格子 QCD による原子核の直接構成 (宇川、藏増)

格子 QCD による原子核の直接構成の研究は平成 21 年度にヘリウム原子核の束縛エネルギー計算により開始され、平成 22 年度には 2 核子系の計算が試みられた。これらの計算は、コストを抑えるためにクエンチ近似かつ重いクォーク質量を用いた試験的なものである。2 核子系にはスピン三重項チャンネル(重陽子)とスピン一重項チャンネルが存在するが、前者のみが束縛状態であり、その束縛エネルギーが 3MeV 弱と極めて小さいことが大きな特徴である。しかしながら、シミュレーション結果は両チャンネルとも束縛状態であり、われわれが見出したスピン一重項チャンネルの束縛状態は、クエンチ近似かつ重いクォーク質量で計算を行ったことによる効果だと考えている。そのため、真空偏極効果を取り入れ物理的クォーク質量に近づけていけば、スピン一重項チャンネルの束縛エネルギーは徐々に減少して最終的に非束縛状態になるのではないかと推測し、本年度は 2+1 フレーバー QCD シミュレーションによりヘリウム原子核および 2 核子系の束縛エネルギー計算を実行した。現在のところ、 π メソン質量が約 500MeV 程度の世界でも 2 核子系の両チャンネルは束縛状態であることが示唆されている。結果は、近々に論文に纏める予定である。

(3) U(1)問題の研究 (石塚、宇川、吉江)

これまで PACS-CS および T2K-Tsukuba を利用して生成された配位を用いて様々な物理量を計算することが可能である。その興味深い一つとして、フレーバー 1 重項の疑スカラー粒子(η' 粒子)の質量の問題(U(1)問題)の研究があげられる。この η' 粒子は、他の疑スカラー粒子と異なり、大きい質量を持つ。これは、 $U(1)_A$ の量子異常による破れによって、質量を獲得すると考えられている。この現象の深い理解の為には、この粒子の質量を格子上の数値計算により定量的に評価し、実験値と比較することが非常に重要である。この研究では、PACS-CS グループ によって生成されたゲージ配位($a=0.0907\text{fm}$, $L=2.9\text{fm}$)の中で、クォーク質量： $m(\pi)=410\text{MeV}$ と $m(\pi)=300\text{MeV}$ の二つの質量のもとで数値計算を行った。このような大きい体積での計算は、これまでに行われていなかった。同じ量子数を持つ疑スカラー粒子： η 粒子との混合は、二種類の演算子を使い相関関数行列を計算する事に

よって解いた。我々の得た η 粒子と η' 粒子の質量の結果は以下である。 $m(\pi)=410\text{MeV}$ では $m(\eta)=593(43)\text{MeV}$, $m(\eta')=850(68)\text{MeV}$, $m(\pi)=300\text{MeV}$ では $m(\eta)=617(53)\text{MeV}$, $m(\eta')=1050(240)\text{MeV}$ である。これらは実験値: $m(\eta)=548\text{ MeV}$, $m(\eta')=958\text{ MeV}$ を、おおむね再現している。しかし、この問題の完全な理解のためには、更に統計誤差を小さくし、クォーク質量を詳細に調査し、その後に実験値と比較する必要がある。現在、統計精度向上させるための計算を継続中である。

【2】格子 QCD によるバリオン間力の研究 (青木、石井、根村、佐々木)

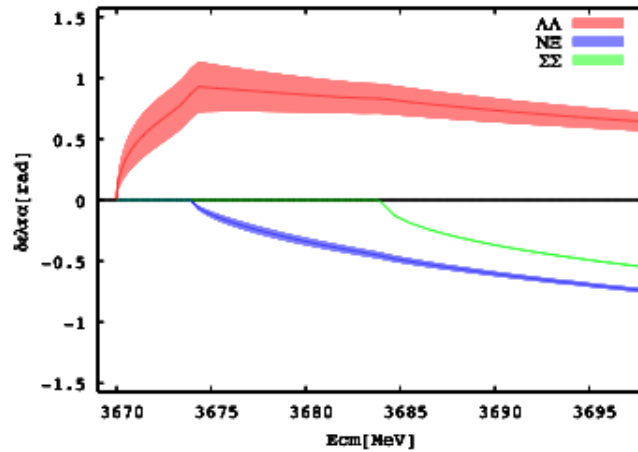
2 つの核子の間に働く力、核力は、中遠距離では引力、近距離では強い斥力になることが実験的に知られているが、この核力の性質、特に近距離での斥力(斥力芯と呼ばれている)を理論的に導くことは、素粒子原子核物理に残された大問題の 1 つである。青木、石井らは、東京大学の初田との共同研究で、二核子系の波動関数から核子間のポテンシャルを導き出すという方法を用いて格子 QCD により計算する方法を提案し、さまざまな研究を進めている。青木はポテンシャルの近距離での振舞を解析的に調べる方法を提案したが、今年度はその方法を3体力に拡張し、核子の場合は3体力は近距離で常に斥力になることを示した。また、石井らはポテンシャルを精度よく求める新しい方法を提案し、力学的クォークの寄与を含んだ計算で核力ポテンシャルを求めた。

(1) フレーバーSU(3)極限での H ダイバリオン

昨年度、HAL QCD Collaboration は、フレーバーSU(3)対称極限では H ダイバリオンが存在することを示したが、今年度はクォーク質量がより重いものと軽いもので計算を行い、H ダイバリオンの束縛エネルギーの質量依存性を詳細にしらべた。また得られたポテンシャルを用いて、SU(3)の破れの効果を近似的な手法で計算した。

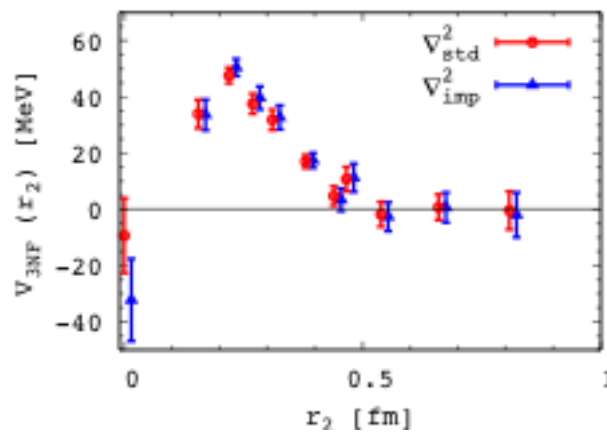
(2) ストレンジネス $S=-2$ のバリオン間相互作用

佐々木らは、従来のHAL QCD collaborationによるポテンシャルの導出方法を結合チャンネル Schroedinger方程式に適用しストレンジネス $S=-2$ の2体バリオン系のポテンシャル行列を得た。この系のspin singlet部分はSU(3)極限でH-dibaryonが束縛しているチャンネルであり、sクォークがu,dより重くなり、SU(3)の破れに伴って この束縛系がどのように変化するかを調べる上で重要な計算となる。現在の計算では、CP-PACS/JLQCD Collaborationによって生成されたパイオン質量が 875MeV に対応する 2+1 フレーバーゲージ配位を使っており、その散乱位相差を見るとH-dibaryonが深く束縛している兆候(図3)を示している。今後の計算により、ハドロン質量が現実世界に近づくにつれてH-dibaryonがどのような運命を辿るかを検証できると期待される。

図3: ストレンジネス $S=-2$ 系の散乱位相差。

(3) バリオン間三体力の研究

近年、原子核の性質、あるいは超新星爆発や中性子星といった高密度系の性質を理解する上で、三体力の果たす役割の重要性が認識されている。土井らは、格子 QCD による三体力の決定に向けた研究を行った。本年度は、三核子系としては三重陽子チャネルを対象とし、三核子が等距離直線上に並んだ空間配置における三体力を研究対象とした。三体力を不定性無く求めるためのフレームワークを構築すると共に、実際の格子計算を、CP-PACS Collaboration によって生成された パイオン質量が 1.1GeV に対応する 2 フレーバーゲージ配位を用いて行った。その結果、近距離において三体斥力効果が存在することを見出した(図4)。

図4: 三核子が等距離 $r_2[\text{fm}]$ で直線上に並んだ場合における三体力 [MeV]。

【3】有限温度・有限密度 QCD の研究 (青木, 金谷)

(1) 固定格子間隔アプローチと T-integral 法による状態方程式の研究

平成 20 年度に開発した T-integral 法に基づく固定格子間隔アプローチは、様々な温度のシミュレーションを、一つの格子スケールで実行する方法で、計算時間を大幅に抑えつつ、精度の高い有限温

度計算を遂行する可能性を拓いている。平成20 年度にクエンチ近似による試験研究で方法としての有効性を確認し、平成21年度から、現実的な $N_f = 2 + 1$ でのシミュレーションを進めている。第一段階として、 u, d クォーク質量が現実より重い点で有限温度シミュレーションを実行し、ウィルソン型クォークとして初めて、 $N_f = 2 + 1$ の状態方程式の計算に成功した(図5)。固定格子間隔アプローチでは、既存のゼロ温度配位を活用できるメリットがある。この研究では、CP-PACS+JLQCD グループによる $N_f=2+1$ QCD の温度ゼロでの研究結果と公開されているゼロ温度ゲージ配位を利用することで、計算コストを大幅に削減した。

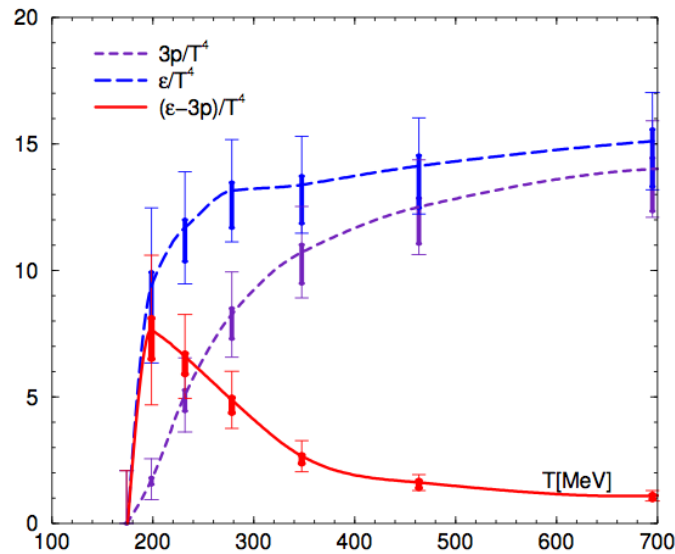


図5: ウィルソン型クォークを用いた $N_f=2+1$ QCD の状態方程式。

p はクォーク物質の圧力、 ϵ はエネルギー密度、 $\epsilon - 3p$ はトレース・アノーマリを表す。 u, d クォークは現実より重く、 $T \sim 200 \text{ MeV}$ あたりが有限温度クロスオーバー温度に相当する。

(2) 有効ポテンシャルによる QCD 有限温度・有限密度相転移の研究

QGP 有限温度・有限密度相転移の次数を判定するうえで、観測量のヒストグラムは最も直感的な情報を含んでいる。他方、系の作用に現れる物理量に関するヒストグラムは、reweighting 法で系のパラメータ依存性を調べる上で、中心的な役割をはたしており、reweighting 法を使う上で必ず計算する量でもある。我々は、これらのヒストグラムから定義される有効ポテンシャルと reweighting 法を組み合わせることにより、相転移次数を容易に判定する解析方法を開発した。

その第一段階のテストとして、クォークが重い領域の QCD の相構造を、密度がゼロの場合(平成22年度)と有限密度の場合(平成23年度)の両方について研究した。クォークが重い領域では、クォークが重い極限から reweighting することにより、 $SU(3)$ 純ゲージ理論のシミュレーションとホッピングパラメータ展開が適用出来る。密度がゼロの場合には、系のゲージ部分の内部エネルギー密度に相当するブラケットの有効ポテンシャルを計算し、その振る舞いから相構造を研究した。reweighting 法から導かれる有効ポテンシャルの微分の簡単な振る舞いを利用して、様々なゲージ結合定数 β におけるシミュレーション結果を組み合わせ、ブラケット期待値の広い範囲で有効ポテンシャルの微分を評価した(図4

左)。それに基づき、有効ポテンシャルを計算して、純ゲージ理論の1次相転移が、動的クォークの効果によりクロスオーバーに変わる臨界点の位置を評価した(図6左)。有限密度では、プラケットと、重いクォークの自由エネルギーに相当するポリアコフループの二つの観測量に関する有効ポテンシャルを調べる必要がある(図6右)。化学ポテンシャルを含むホッピングパラメータ展開とシミュレーションにより、クォークによる有限密度位相項の評価を行い、1次相転移がクロスオーバーに変わる臨界点の位置は、位相項を無視した「位相クエンチ QCD」の臨界点からほとんど動かないことを示した。

この研究の最終目標は、クォークが軽い領域における QCD の有限密度相構造の解明である。現在それに向けて、研究を進めている。クォークが軽くなると、ポリアコフループは重要な役割を果たさなくなるので、クォーク部分の内部エネルギーに対応する、クォーク行列式そのものに関する有効ポテンシャルを研究する。位相クエンチ QCD でシミュレーションを実行し、化学ポテンシャルが小さい領域で有限密度位相項の効果を reweighting 法で評価した結果、この領域では位相校の効果が小さいことを確認した。現在、化学ポテンシャルがより大きい場合を研究している。

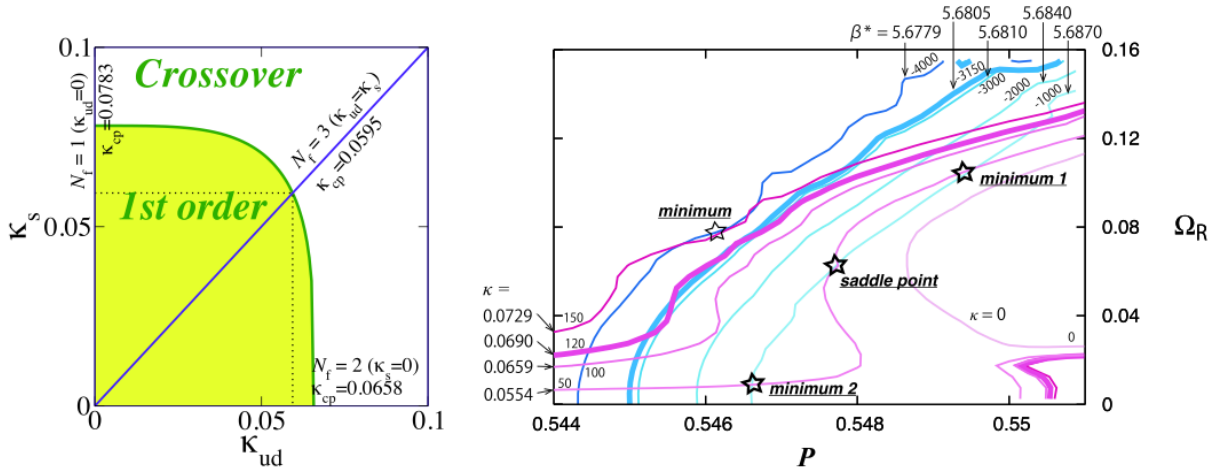


図6: 重クォーク領域における $N_f=2+1$ QCD の有限温度相構造の研究。

(左) 密度ゼロの場合の、有限温度相転移次数のクォーク質量依存性。横軸は ud クォーク質量の逆数、縦軸は s クォーク質量の逆数を表し、緑の領域は有限温度相転移が1次となる範囲を表す。(右) 有限密度の場合の有効ポテンシャルの温度、およびクォーク質量依存性。赤い線と青い線は、それぞれ、有効ポテンシャルの物理量 P (プラケット) と Ω_R (ポリアコフ・ループ) に関する微分がゼロになる場所を表す。赤い線と青い線が交差する点で、有効ポテンシャルの極小点や鞍点の位置がわかる。極小点が二つある場合は相転移が1次で、一つになるとクロスオーバーになる。

(3) 格子上の中間子スペクトル関数の研究

チャーモニウムなどのスペクトル関数の研究は、クォーク・グルーオン・プラズマ(QGP)の性質を研究する上で重要な情報を与えている。これまで格子上では、最大エントロピー法を用いた計算が主に行われてきたが、仮想モデルの選び方に由来する結果の不定性の問題や、有限の格子上では離散的なはずのスペクトル関数が連続関数になってしまう原理的な欠陥があり、最終的なスペクトル関数の信頼性が問題となっている。我々は、対角化の方法を用いて、離散的なスペクトル関数を評価する方法を開発

し、その有効性を検証した。自由 Wilson クォークの場合に、中間子伝搬関数から対角化の方法を使って得られるスペクトル関数と、スペクトル関数の解析解を比較し、対角化の方法で用いる規定の数を十分大きくすることで、解析解が再現されることを確認した。他方、時間方向の格子サイズや数値精度の限界による制限も明らかにした。次に、クエンチ近似 QCD を研究し、基底状態に関しては、最大エントロピー法によるスペクトル関数のピークの位置とピーク周りの面積を、対角化の方法でよく再現することを示した。他方、第一励起状態に関しては、対角化の方法の方が実験値に近い結果を導くことを示した。有限温度では、格子サイズの制限により明確な結論は得られなかったが、少なくとも臨界温度の 1.4 倍の温度まで、 J/Ψ などが消失する兆候は確認できなかった。

【4】有限密度 QCD (宇川、藏増)

有限密度 QCD 研究のためには、非ゼロ化学ポテンシャル領域での格子 QCD 計算が必要となる。しかし、化学ポテンシャルの導入は「符号問題」を引き起こしてしまう。そのような困難を克服すべく、われわれはまず符号問題の解析的研究を行った。具体的には、クォーク行列式を巻き付き展開法を用いて表すことにより、符号問題の根源である複素位相を解析的に表現し、さらに重質量展開法を適用することによって位相の上限値が格子の空間体積に比例し、時間方向の伸張とともに指数関数的に抑制されることを見出した。この解析的結果を検証するために、格子サイズ $6^3 \times N_T$ の 4 フレーバー QCD において N_T を変えることにより、位相がどのように変化するかを調べた結果が図 2 にまとめられている。化学ポテンシャル μ を固定すれば、 N_T を大きくするほど位相 θ の大きさが小さくなるが見て取れる。今後、巻き付き展開法を用いて相転移のオーダーパラメータであるクォーク数密度を計算し、相転移の次数や相転移温度を決定する計画である。

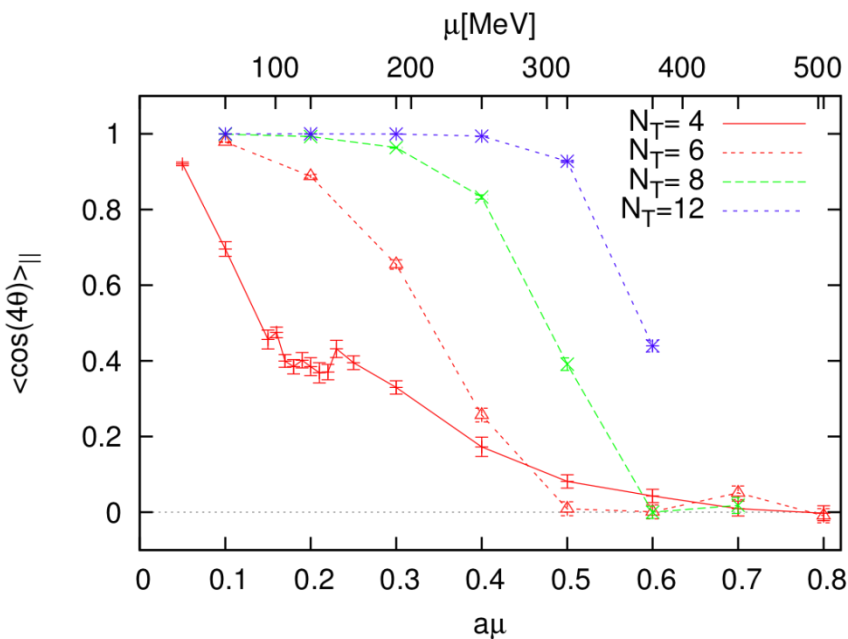


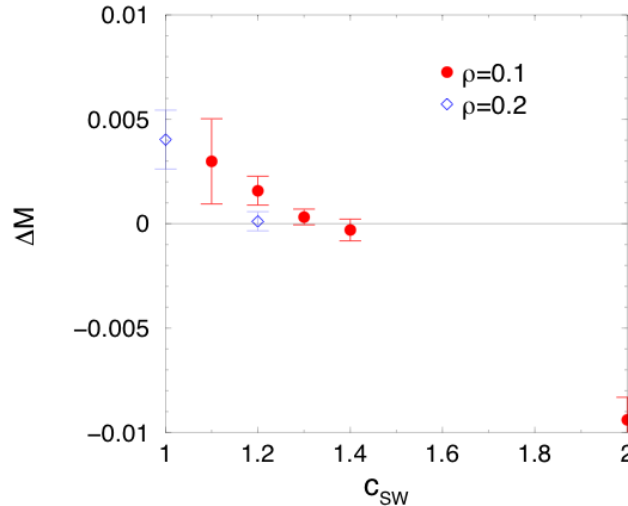
図2 4 フレーバーQCD における位相の化学ポテンシャル依存性。

格子サイズ $6^3 \times N_T$ を用いた 4 フレーバー QCD の結果。

【5】繰り込み定数や改良係数の計算（谷口）

$K \rightarrow \pi \pi$ 崩壊過程の行列要素を繰り込むために必要な繰り込み定数を、Iwasaki gauge action と clover 項により改良された Wilson fermion action の組み合わせについて計算した。

次世代の京コンピュータにおける数値計算で採用すべき action のパラメータ探索の一環として、smeared link を用いた Wilson fermion action において、clover 項の改良パラメータ C_{SW} の決定を行いました。今回は手始めとして、smearing の回数は一回で、smearing parameter は $\rho = 0.1, 0.2$ を採用した。



図：パラメータ C_{SW} の決定。 $\Delta M=0$ となる点として C_{SW} を決定。

【6】ILDG/JLDG の構築・運用に係わる活動（吉江, 浮田）

国内の格子QCD 研究者のデータグリッドJapan Lattice Data Grid (JLDG) の利便性・可用性の向上のため、以下の改良を行った。(1)既設拠点のサーバ増設(筑波大、KEK、大阪大、広島大)、(2) 拠点の新設(東京大、名古屋大)、(3)JLDGファイルシステムマウント機能の実装(筑波大)、(4)管理機器の2重化、(5)管理・運用・保守マニュアルの作成(外注)。

格子QCD共通コードとILDG(International Lattice Data Grid)の連携に関し、次の検討を行った。(1)ILDG フォーマットの配位入出力、(2) エジンバラ大学と共同で開発した Metadata Capture システムの利用。

4. 研究業績

(1)研究論文

【1】関連

1. PACS-CS Collaboration: T. Yamazaki, Y. Kuramashi, A. Ukawa, Two-nucleon bound states in quenched lattice QCD, Phys. Rev. D 84 (2011) 054506.
2. PACS-CS Collaboration: Y.Namekawa, S.Aoki, K.-I.Ishikawa, N.Ishizuka, T.Izubuchi, K.Kanaya, Y.Kuramashi, M.Okawa, Y.Taniguchi, A.Ukawa, N.Ukita, T.Yoshié, Charm quark system at the

physical point of 2+1 flavor lattice QCD, Phys. Rev. D 84 (2011) 074505.

3. Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai, H. Tadano, Modified block BiCGStab for lattice QCD, Comput. Phys. Commun. 183 (2012) 34.
4. PACS-CS Collaboration: T. Yamazaki, Y. Kuramashi, A. Ukawa,, Calculation of Helium nuclei in quenched lattice QCD, AIP Conf. Proc. 1374 (2011) 627.
5. N. Ukita for PACS-CS Collaboration, 1+1+1 flavor QCD+QED simulation at the physical point, Proceedings of Science (Lattice 2011) 144.
6. Y. Namekawa for PACS-CS Collaboration, Charm quark system on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD, Proceedings of Science (Lattice 2011) 132.
7. PACS-CS Collaboration: A. Aoki et al., Rho meson decay in 2+1 flavor lattice QCD, Phys. Rev. D84(2011) 094505.
8. N. Ishizuka for PACS-CS Collaboration, Rho meson decay width from 2+1 flavor lattice QCD, Proceeding of Science (LATTICE2011) 125.

【2】関連

9. Keiko Murano, Noriyoshi Ishii, Sinya Aoki, Tetsuo Hatsuda, ``Nucleon-Nucleon Potential and its Non-locality in Lattice QCD `` , Prog. Theoretical. Phys. 125 (2011) 1225-1240
10. T. Doi, S. Aoki, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, N. Ishii, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki (HAL QCD Collaboration), Exploring Three-Nucleon Forces in Lattice QCD, arXiv:1106.2276 [hep-lat] (2011), Prog. Theor. Phys., in press.
11. Sinya Aoki, Noriyoshi Ishii, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Yoichi Ikeda, Takashi Inoue, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura, Kenji Sasaki (HAL QCD Collaboration), ``Extraction of Hadron Interactions above Inelastic Threshold in Lattice QCD'', Proc. Jpn. Acad., Ser. B, Vol. 87 (2011) 509-517.
12. Sinya Aoki for HAL QCD Collaboration, ``Hadron interactions in lattice QCD `` , Progress in Particle and Nuclear Physics 66 (2011) 687-726.
13. Takashi Inoue, Sinya Aoki, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Yoichi Ikeda, Noriyoshi Ishii, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura, Kanji Sasaki (HAL QCD Collaboration), ``Two-Baryon Potentials and H-Dibaryon from 3-flavor Lattice QCD Simulations `` , arXiv:1112.5926 [hep-lat], Nucl. Phys. A, in press.
14. Kenji Sasaki (for HAL QCD Collaboration), ``Strangeness S=-2 baryon-bayon interactions from lattice QCD'', Proceedings of Science (Lattice 2011) 173

【3】関連

15. Kazuyuki Kanaya, Lattice results on the phase structure and equation of state in QCD at finite temperature, AIP Conference Proceedings 1343 (2011) 57-62.

16. H. Saito, S. Ejiri, S. Aoki, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Ohno, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), Phase structure of finite temperature QCD in the heavy quark region, Phys. Rev. D 84 (2011) ref.054502, pp.1-9.
17. H. Ohno, S. Aoki, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Saito and T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), Charmonium spectral functions with the variational method in zero and finite temperature lattice QCD, Phys. Rev. D 84 (2011) ref.094504, pp.1-13.
18. Y. Nakagawa, S. Ejiri, S. Aoki, K. Kanaya, H. Ohno, H. Saito, T. Hatsuda, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), Histogram method in finite density QCD with phase quenched simulations, PoS(LATTICE 2011) (2012) ref.208, pp.1-7.
19. H. Saito, S. Aoki, K. Kanaya, H. Ohno, S. Ejiri, Y. Nakagawa, T. Hatsuda, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), Finite density QCD phase transition in the heavy quark region, PoS(LATTICE 2011) (2012) ref.214, pp.1-7.
20. S. Ejiri, S. Aoki, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Nakagawa, H. Ohno, H. Saito, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), Numerical study of QCD phase diagram at high temperature and density by a histogram method, Cent. Eur. J. Phys. (2012) in press.
21. Y. Maezawa, T. Umeda, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, K. Kanaya and H. Ohno (WHOT-QCD Collaboration), Free energy of static quarks and Debye screening mass in 2+1-flavor lattice QCD with Wilson quark action based on fixed-scale approach, arXiv:1112.2756[hep-lat].
22. T. Umeda, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Ohno (WHOT-QCD Collaboration), Equation of state in 2+1 flavor QCD with improved Wilson quarks by the fixed scale approach, arXiv:1202.4719[hep-lat].
23. 斎藤華, 朴泰祐, 金谷和至, 塙敏博, 佐藤三久, スクリプト言語Xcryptによる格子QCDシミュレーションの最適化, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(58), pp. 1-6
24. 斎藤華, 朴泰祐, 金谷和至, 塙敏博, 佐藤三久, スクリプト言語 Xcrypt による格子 QCD シミュレーションの自動化, 2012年ハイパフォーマンズコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2012) 論文集, pp. 7-14

【4】関連

25. S. Takeda, Y. Kuramashi, A. Ukawa, On the phase of quark determinant in lattice QCD with finite chemical potential, arXiv: 1111.6363 [hep-lat].

【5】関連

26. Y. Taniguchi, “Renormalization factor of four fermi operators with clover fermion and Iwasaki gauge action “, PoS LATTICE2011 (2011) 331.

その他

27. Taro Kimura, Shota Komatsu, Tatsuhiro Misumi, Toshifumi Noumi, Shingo Torii, Sinya Aoki, “Revisiting symmetries of lattice fermions via spin-flavor representation “, JHEP 01 (2012) 048.

28. Sinya Aoki, Hidenori Fukaya, ``Interpolation between the epsilon and p regimes'', Phys.Rev.D84 (2011)014501.

(2)学会発表

(A)招待講演

1. 青木慎也「Nuclear Force from Quarks and Gluons」`Japan Days` Colloquium, May 2, 2011, University of Wuppertal, Wuppertal, Germany (The 150th anniversary of the Friendship Treaty between Japan and Germany)
2. 青木慎也「Lattice QCD with Wilson quarks and chiral perturbation theory--From introduction to recent topics--」ECT* Workshop ``Chiral dynamics with Wilson fermions'', October 24-28, 2011, ECT*, Toronto, Italy.
3. 青木慎也「Future prospect of hadron physics from lattice QCD」Workshop on 'Future Prospects of Hadron Physics at J-PARC and Large Scale Computational Physics' Feb. 9 (Thu) - 11 (Sat), 2012, Ibaraki Quantum Beam Research Center, Tokai, Japan
4. 青木慎也「Chiral Symmetry and eigenvalue density at Finite temperature」YIPQS-HPCI international-molecule-type workshop on 'New-type of Fermions on the Lattice' Feb.9-24, 2012, YITP, Kyoto, Japan
5. 金谷和至「Phase Structure of QCD from the Lattice」International Workshop on Extreme QCD 2011 (XQCD 2011) (San Carlos, Mexico, July 18-20, 2011)
6. 金谷和至「CP-PACS プロジェクトについて ～計算科学専用計算機開発における物理屋の役割～」三好甫先生記念計算科学シンポジウム（工学院大学新宿キャンパス，東京，Sept. 10, 2011）
7. 藏増 嘉伸「PACS-CS における素粒子物理学研究」，第 2 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム（筑波大学，つくば市，2011 年 9 月 12-13 日）
8. 藏増 嘉伸「格子 QCD による原子核の構成」，研究会「大規模計算による原子核研究の展開－核子多体系を中心に－」（理研，和光市，2012 年 1 月 24-25 日）
9. 藏増 嘉伸「大規模格子 QCD シミュレーションで探る 10^{-13}cm 」，第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム（シーサイドホテル舞子ビラ神戸，神戸市，2012 年 3 月 3-5 日）

(B)その他の学会発表

1. 藏増 嘉伸「基礎科学分野実問題における固有値解析エンジンの高性能利用技術開発」，並列固有値解析研究会（伊香保温泉旅館 よろこびの宿 しん喜，群馬県，2011 年 11 月 3-4 日）
2. N. Ukita「1+1+1 flavor QCD+QED simulation at the physical point」，The XXIX International Symposium on Lattice Field Theory, Lattice 2011 (Squaw Valley, Lake Tahoe, CA, USA, July 11-16, 2011)
3. Yusuke Namekawa「Charm quark system on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD」，The XXIX International Symposium on Lattice Field Theory, Lattice 2011 (Squaw Valley, Lake Tahoe,

- CA, USA, July 11-16, 2011)
4. 滑川 裕介「Charm quark system on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD」, 新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」クロスオーバー研究会 (理化学研究所計算科学研究機構, 神戸市, 2011 年 6 月 23-24 日)
 5. 滑川 裕介「物理点における 2+1 フレーバー格子 QCD シミュレーションによるチャームクォーク系の研究」, 日本物理学会 2011 年秋季大会 (弘前大学, 青森県, 2011 年 9 月 16-19 日)
 6. Yusuke Namekawa「Charm quark physics from lattice QCD」, “Hadron Structure and Interactions” (RCNP, Osaka, Nov. 25-26, 2011)
 7. 滑川 裕介「Charm quark physics from lattice QCD」, 「素核宇宙融合による計算基礎物理学の進展」(会飲の郷, 三重県, 2011 年 12 月 3-5 日)
 8. Yusuke Namekawa「Charm quark physics from lattice QCD」, HPCI Workshop “Expanding the Horizon of Theoretical Particle Physics through Computational Methods” (KEK, Tsukuba, Dec. 19-21, 2011)
 9. Yusuke Namekawa「Charm quark physics from lattice QCD」, Workshop on “Elucidation of New Hadrons with a Variety of Flavors” (Osaka University, Osaka, Feb. 20-21, 2012)
 10. Yusuke Namekawa「Charm quark physics from lattice QCD」, KEK Flavor Factory Workshop (KEK, Tsukuba, Mar. 8-10, 2011)
 11. 石塚 成人「Rho meson decay width from 2+1 flavor lattice QCD」, The XXIX International Symposium on Lattice Field Theory, Lattice 2011. (the Village at Squaw Valle, Lake Tahoe, California, USA, July 11-16, 2011)
 12. 石塚 成人「格子上のハドロン散乱」, 新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」クロスオーバー研究会 (理化学研究所 計算科学研究機構, 兵庫県 神戸, 2011 年 6 月 24 日 - 24 日)
 13. 石塚 成人「Rho meson decay from lattice QCD」, 日本物理学会 (弘前大学, 弘前市, 2010 年 9 月 16 - 19 日)
 14. 佐々木 健志 (for HAL QCD Collaboration), 「チャンネル結合を考慮した格子 QCD によるハイペロン間相互作用」, 新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」クロスオーバー研究会 (理化学研究所 計算科学研究機構), 2011 年 6 月 23-24 日
 15. Kenji Sasaki (for HAL QCD Collaboration), 「Strangeness $S=-2$ baryon-baryon interactions from lattice QCD」, The XXIX International Symposium on Lattice Field Theory (Squaw Valley, Lake Tahoe, California, USA), July 10-16, 2011
 16. 佐々木 健志 (for HAL QCD Collaboration), 「Lattice QCD study of baryon-baryon interaction with strangeness $S=-2$ 」, 日本物理学会 2011 年秋季大会 (弘前大学), 2011 年 9 月 16-19 日
 17. 佐々木 健志 (for HAL QCD Collaboration), 「Lattice QCD studies of strangeness $S=-2$ baryon-baryon interactions」, 素核宇宙融合による計算基礎科学物理学の進展 (三重県志摩市 合歓の郷), 2011 年 12 月 3-5 日
 18. 佐々木 健志 (for HAL QCD Collaboration), 「格子 QCD による一般化核力の研究」, HPCI 戦略

プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム(秋葉原コンベンションホール),
2012 年 3 月 7-8 日

19. 齋藤華, 朴泰祐, 金谷和至, 塙敏博, 佐藤三久「スクリプト言語 Xcrypt による格子 QCD シミュレーションの最適化」2011 年並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ(SWoPP2011) (, July 27-29, 2011)
20. 齋藤華, 朴泰祐, 金谷和至, 塙敏博, 佐藤三久「スクリプト言語 Xcrypt による格子 QCD シミュレーションの自動化」2012 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2012) (, Jan. 24-26, 2012)
21. Y. Taniguchi, The XXIX International Symposium on Lattice Field Theory, Village at Squaw Valley, Lake Tahoe, California, USA, July 11 to July 16, 2011.
22. 谷口 裕介, HPCI 研究会「計算的手法による素粒子論研究の広がり」 --- Expanding the Horizon of Theoretical Particle Physics through Computational Methods, December 19-21, 2011, Kobayashi Hall, KEK
23. 吉江友照, 「計算素粒子物理学データグリッド JLDG」、gfarm セミナー、NTTコミュニケーションズプレゼンテーションルーム(2011/06/20)
24. 吉江友照, 「Status Report: JLDG」、17thILDG workshop, TV conference hosted by INFN, Italy (2011/09/23)
25. 吉江友照, 「HEPnet-J/sc 報告」、HEPnet-J ユーザー会、近畿大学(2011/12/17-18)
26. 吉江友照, 「格子 QCD データグリッド JLDG」、HPCI 分野5全体シンポジウム、秋葉原コンベンションホール (2012/03/07-08)

4. 連携・国際活動・社会貢献、その他

1. 青木慎也 他, 新学術領域「素核宇宙融合」x「新ハドロン」クロスオーバー研究会 ---多様な方法でせまるハドロン物理への挑戦--- 主催 2011 年 6 月 23、24 日、理化学研究所 計算科学研究機構、神戸、参加者約60名
2. 青木 慎也 他, 新学術領域「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」/HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」/京都大学基礎物理学研究所 主催 サマースクール「クォークから超新星爆発まで」---基礎物理の理想への挑戦---, 2011 年 8 月 4 日-8 日、京都大学 基礎物理学研究所、京都、参加者約35名
3. 青木慎也 他, 新学術領域「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」/HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」主催シンポジウム「素核宇融合による計算基礎物理学の進展 -ミクロとマクロのかけ橋の構築-」 2011 年 12 月3日-5 日、合歓の郷、志摩、参加者約60名
4. 科研費新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」レクチャーシリーズの主催 第三回 2011 年 6 月 8-9 日(参加者約40名) 東京大学 理学部、東京 第四回 2012 年 1 月 11-12 日 京都大学 基礎物理学研究所、京都(参加者約30名)、第五回 2012 年

2 月 27-28 日 理化学研究所 仁科加速器研究センター、和光(参加者約20名)

5. 青木 慎也 他, HPCI 戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム, 2012 年 3 月 7、8 日、秋葉原コンベンションホール、東京、参加者約60名

6. 金谷 和至 他, 国際シンポジウム「Quarks and Hadrons under Extreme Conditions – Lattice QCD, Holography, Topology, and Physics at RHIC/LHC –」(慶應義塾大学 来往舎, 2011年 11 月 17-18 日) 参加者 38 名(内, 海外5ヶ国6名)

II. 宇宙・原子核物理研究部門

II-1. 宇宙分野

1. 構成メンバ

教授 梅村 雅之
准教授 森 正夫
講師 吉川 耕司
准教授 岡本 崇 (HPCI 戦略プログラム)
助教 川勝 望 (理数学生応援プロジェクト)
研究員 谷川 衝 (科研費基盤 S)
行方 大輔 (科研費基盤 S)
川口 俊宏 (科研費基盤 A)
石山 智明 (HPCI 戦略プログラム)
長谷川 賢二 (HPCI 戦略プログラム)
Alexander Wagner (センター)
大学院生 9 名
4 年生 7 名

2. 概要

本年度、当グループスタッフは、FIRST プロジェクトを推し進めると共に、FIRST, T2K-Tsukuba を用いて、宇宙論的銀河形成シミュレーション、粒子法輻射流体による宇宙再電離シミュレーション、メッシュ流体用高速輻射輸送計算、大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長、ダークマターハローの内部構造：コア・カusp問題、アンドロメダの涙とさざめき、銀河系中心領域の特異な物理環境が分子雲形成に与える影響、6 次元 Vlasov 方程式による自己重力系数値シミュレーションの研究を行った。さらに、AVX 命令版 Phantom-GRAPE の開発、HA-PACS に向けたアプリケーションの開発、「京」を用いた銀河形成シミュレーションを行った。また、宇宙・生命・物性・原子核分野連携で星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰の理論的研究を行った。また、プレ戦略イニシアティブ「アクセラレータによる銀河輻射流体力学の幕開け」(代表者 森正夫) の継続が採択され、輻射流体力学実現のための演算加速器を搭載した並列計算機システム構築を開始し、プロトタイプ制作を行った。

3. 研究成果

(1) 宇宙論的銀河形成シミュレーション

ガスの冷却や星形成、超新星爆発等の物理過程を取り入れた宇宙論的銀河形成シミュレー

ションを用いて以下のような研究を行った (i) 遠方宇宙の星形成銀河であるライマンアルファエミッターやサブミリ波で明るく輝くサブミリ銀河の物理的性質を明らかにした (Shimizu et al. 2012ab). (ii) 銀河系サイズの銀河を高分解能な宇宙論的シミュレーションで形成し、衛星銀河の性質を調べた.その結果、光度関数を再現すると、シミュレーションで得られた力学的質量が実際のそれよりも大きくなることが明らかになった. これは CDM モデルそのものに問題があるか、現在のシミュレーションではバリオンがダークハローの構造に与える影響を適切に評価できていないことを示唆する (Parry et al. 2012). (iii) 同様のシミュレーションを用いて銀河系バルジの形成について調べ、擬バルジと呼ばれる構造が今まで考えられていたような円盤の永年進化ではなく高赤方偏移の爆発的星形成で形成されるという新しい描像を提案した (Okamoto 2012). また、様々なグループ間での銀河形成モデルを比較するプロジェクトにも参加した (Scannapieco et al. 2012).

(2) 粒子法輻射流体による宇宙再電離シミュレーション

宇宙は赤方偏移 $z=1000$ 程度で一度中性化し、その後形成された天体からの輻射によって再び電離したと考えられている。キューサー吸収線系を利用した観測(e.g., Fan et al. 2006)では、 $z=6$ 程度ではすでに宇宙は高度に電離している事が示されているが、この宇宙再電離過程がいつ始まり、どのように進んだかは未だ明らかではない。

宇宙再電離史を解き明かすには、銀河間空間への電離光子供給源である天体の形成史とそれに伴う電離領域の進化過程を同時に計算する必要があるが、この天体形成史自体に輻射性フィードバックが影響を及ぼす為、輻射流体計算が必要となる。このような計算では、多くの放射源を取り扱う必要がある為、非常に膨大な計算コストが要求される。そこで、我々は独自に開発したツリー構造を用いて高速に輻射輸送計算を行えるスキーム **START (SPH with Tree-based Accelerated Radiative Transfer)** (Hasegawa & Umemura 2010)を宇宙論的輻射流体計算に対応できるように拡張し、これを用いて宇宙再電離シミュレーションを行った(Hasegawa & Semelin in prep.)。

シミュレーションの結果、宇宙の星形成史は主に光加熱効果によって著しく阻害される事が分かった。この星形成の阻害は、低質量ハロー内のみならず $\sim 10^{10}$ 太陽質量の大質量ハロー内でさえも顕著に起こる。得られた結果は、 $z=6-7$ での中性水素割合を特異な仮定をする事なく再現するが、一方でトムソン散乱に対する光学的厚みは WMAP 衛星の観測結果よりも小さな値を示した。この結果は、今回のシミュレーションでは分解できていない第一世代天体からの紫外線やブラックホールからの X 線などの輻射が宇宙初期での再電離史に強く寄与した事を示唆する。

(3) メッシュ流体用高速輻射輸送計算

メッシュ法を用いた輻射流体シミュレーションを高速に行うために、メッシュ上で効率良

く輻射輸送を解くコード ARGOT (Okamoto et al. 2012) を開発した。粒子法用に開発された START と同様に Tree 構造を用いて遠方の光源を見込み角によってまとめることにより、光源数 N_s を $\log(N_s)$ に減らすことにより輻射輸送計算を高速化する。また問題によっては輻射輸送を解くメッシュも粗視化することによりさらなる並列化を行う。現在、京のような大規模並列計算機で効率良く動作するように並列化アルゴリズムの見直しを行っている。

(4) 大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長

銀河中心には 106 から 109 太陽質量の巨大ブラックホールが存在するが、その起源は明らかにされていない。冷たいダークマターモデルに基づく階層的銀河形成シナリオでは、銀河はより小さな銀河の合体によって形成されるため、合体後の銀河には複数の巨大ブラックホールが存在することになるが、これは銀河中心に巨大ブラックホールが一つ存在するという観測事実と合致しない。我々は 1 つの銀河の中に取り込まれた複数の巨大ブラックホールがどのように進化するかを、宇宙シミュレータ FIRST を用いた高精度 N 体計算によってシミュレートした。その結果、銀河に取り込まれた巨大ブラックホールは星との力学的摩擦によって銀河中心に落ちて行き、ブラックホール 3 体相互作用の効率が増し、結果としてブラックホールの連続的合体成長によって中心に一つの巨大ブラックホールが形成されることを明らかにした。これは、FIRST を 1 年近く占有して得られた成果である。

(5) ダークマターハローの内部構造：コア-カスプ問題

宇宙の構造形成のパラダイム、コールドダークマター(CDM)シナリオは、N 体シミュレーションによるとダークマター(DM)ハロー中心部で質量密度が発散する(カスプ)構造を预言する(Navarro, Frenk & White 1997; Fukushige & Makino 1997)。しかし、その観測結果によると、矮小銀河の密度は中心部で発散せず、一定となる(コア)ことが報告されている(Swaters et al. 2003; Spekkens et al. 2005; Oh et al. 2010)。この理論と観測の不一致は"コア-カスプ問題"と呼ばれ、CDM シナリオの未解決問題の一つである。今回我々は、"超新星爆発により矮小銀河内のガスが加熱・膨張し、やがて放射冷却・収縮が起こり再び星形成が起こる、という一連の過程の繰り返しの重力場変動によりカスプがコアへと遷移するか"を N 体シミュレーションを用いて調べた。ここでバリオンの重力場は周期的に時間変化する外場によって表現した。その結果バリオンの重力場変動の時間スケールに依存して DM ハローに形成されるコアの大きさや位置が大きく変化する事がわかった。また、DM ハローの粒子群と外場間で起こる共鳴的な現象に対する解析的なモデルを構築した。

(6) アンドロメダの涙とさざめき

近年、ハッブル宇宙望遠鏡やすばる望遠鏡に代表される地上大型望遠鏡を最大限活用した近傍の深宇宙探査により、現在も続く銀河進化の過程を垣間見ることができるようになっ

てきた。アンドロメダ銀河においては、SDSS 等の観測によって、おびただしい数の暗い矮小銀河が発見されるとともに、それら矮小銀河の衝突によるものと思われるステラーストリームやステラージェル等の痕跡が続々と明らかにされてきている。特にアンドロメダの涙（アンドロメダストリーム）に関しては、観測・理論の両面からの研究が進展してきており、銀河衝突の際の軌道運動やその時期、衝突した銀河の質量や化学組成等について理解が進んできている。我々は、N 体計算と 3 次元の流体力学計算を組み合わせたハイブリッドシミュレーションにより、アンドロメダ銀河の円盤ガスと矮小銀河に付随するガスの流体力学的な相互作用の詳細について調べた。に、銀河円盤ガスと矮小銀河ガスの相互作用により発生する銀河円盤ガスの流体力学的な挙動と、アンドロメダの円盤ガスで観測されているリング状構造の生成過程について議論した。

（7）銀河系中心領域の特異な物理環境が分子雲形成に与える影響

銀河系中心領域(ここでは、銀河系中心から半径で 600 光年以内とする)は、太陽系が存在する銀河系円盤部とはかなり異なった物理環境(星間磁場や星間輻射場の大きさ、宇宙線強度やシア率等)にあることが観測的に知られている。物理環境の違いが星形成サイトである分子雲の形成過程に与える影響を調べるため、本研究では特に磁場の役割に注目して、銀河系中心領域の分子雲形成の 3 次元磁気流体シミュレーションを行った。その結果、磁場によって超新星爆発によるガスの鉛直持ち上げ効果が抑制され、星形成率が磁場なしの場合に比べ大きくなるような磁場強度範囲があることがわかった。

（8）6 次元 Vlasov 方程式による自己重力系数値シミュレーション

6 次元位相空間上での無衝突ボルツマン(Vlasov)方程式を直接数値的に解くことによって無衝突自己重力系の数値シミュレーションを行うことに世界で初めて成功した。また、この手法を宇宙論的な共動座標系に拡張することによって宇宙の大規模構造形成のシミュレーションにも適用することが可能になった。位相空間をモンテカルロ的にサンプリングする N 体計算による数値シミュレーションと異なり、位相空間上の物質分布を連続体として計算するため、(i)人工的な二体緩和の影響を受けない、(ii)物理量がショットノイズで汚染されない、などのメリットがある。特に、無衝突減衰などの従来の N 体シミュレーションが苦手としてきた速度空間の物質分布に強く依存する物理過程を正確に解くことができるため、宇宙大規模構造形成におけるニュートリノダンピングなどの計算に応用できると期待される。

（9）AVX 命令版 Phantom-GRAPE (吉川)

2011 年にリリースされた Intel の新型プロセッサ Sandy-Bridge で新たに実装された SIMD (Single-Instruction-Multi-Data) 命令である Advanced Vector eXtension (AVX) 命令セットを用いた、重力多体数値計算ライブラリ Phantom-GRAPE を開発し、これまでの SIMD

命令である Streaming SIMD Extension (SSE)命令セットを用いたものよりもより高速な演算を実現した。Phantom-GRAPE は、4 次エルミート積分を軌道計算に用いる高精度な衝突系重力多体用と、銀河や銀河団などの無衝突系用の 2 種類を開発し、Google Code で公開してある。

(10) HA-PACS に向けたアプリケーション開発

2012 年から運用を開始した筑波大学計算科学研究センターの新型スーパーコンピュータ HA-PACS での実行を念頭に置いた宇宙物理分野での数値シミュレーションのアプリケーション開発を行った。HA-PACS は 8 コアの Sandy Bridge を 2 ソケットと 4 基の GPU (M2090) を一つの計算ノードに搭載しており、このようなシステムで高い性能を発揮できるアプリケーションとして、衝突系自己重力多体計算と輻射流体計算を選定した。前者については以前の GRAPE システムの役割を GPU に担わせることで、これまでの数値シミュレーションの延長線上でさらに粒子数を増やすことでより現実的な星団の数値シミュレーションを実行することが可能である。後者については、主に計算コストの大きな輻射輸送部分の計算を GPU で実行することで、輻射輸送計算と流体力学計算をカップルさせて計算することが可能になると期待される。これらのアプリケーションについて HA-PACS の試験運用期間を利用して、コード開発及び性能評価を行った。

(11) 「京」を用いた銀河形成シミュレーション

ダークマターの密度ゆらぎが重力崩壊してできるハローと呼ばれる構造は、合体を繰り返してより大きなハローを形成し、その中で初代星や銀河などの天体を形成する。本研究の目的は大規模シミュレーションにより、このプロセスを最小のハローを正しく解いた上で追跡することで、その後の天体形成に多大な影響を及ぼす、ハローの構造形成メカニズムを理解することである。また太陽近傍のダークマターの微細構造を解明し、ダークマターの検出可能性について議

論する。これは 2012 年度半ばに本運用が開始される「京」のグランドチャレンジの一つである。そのため 2011 年度は、まずシミュレーションコードの「京」上でのチューニングを進め、数万ノード上で 40~50%の実行効率を達成した。そして 2012 年度に行う予定の本ランに向けて粒子数 2560^3 のテストシミュレーションを行った

(12) 星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰の理論的研究 (宇宙・生命・物性・原子核分野連携)

生命体の基本分子にアミノ酸があるが、実験室でアミノ酸を作成すると、左巻き (L 型) と右巻き (D 型) が同量生成される。しかし、地球上の生命のアミノ酸を調べるとほとんど L 型しか使われていない。これを、鏡像異性体過剰という。鏡像異性体過剰は、19 世紀のパ

スツール以来 100 年以上にわたって謎になっている。地球上の生命体はなぜ L 型アミノ酸しか使わないのか、宇宙生物学ではその起源が宇宙空間にあると考えている。1969 年、オーストラリアのマーチソン村に隕石が落下し、その隕石からアミノ酸が検出された。そして、わずかではあるが鏡像異性体過剰が発見されたのである。2010 年には、超高温の隕石からアミノ酸が発見され、隕石のアミノ酸は地球に大気圏通過の際に変成することなく落下することが分かった。発見された鏡像異性体過剰はわずかなものであるが、実験をすると鏡像異性体過剰は急速に増大することが分かってきた。よって、アミノ酸の鏡像異性体過剰が宇宙空間で起こり隕石を通じて地球に運ばれ、それが地上で急速に増幅した可能性がある。また、実験室で円偏光の光を当てると鏡像異性体過剰が引き起こされることが分かってきた。そして、近年になって、オリオン座の星形成領域(OMC-1)で円偏光波が発見された。よって、原始系の近くで大質量星が誕生したとすれば、太陽系内でアミノ酸の鏡像異性体過剰が起こった可能性がある。現在のところ宇宙空間ではアミノ酸前駆体しか観測されていないが、将来アミノ酸そのものが観測される期待もある。

以上の事実を背景に、宇宙空間で円偏光波からアミノ酸の鏡像異性体過剰を引き起こす過程についての量子多体計算を進めている。我々は、まず光吸収とアミノ酸の光励起による崩壊・改変反応の過程を解析した。第一原理計算により、真空中におけるアミノ酸の最安定構造を求め、その光吸収性と円偏光二色性の値を求めた。その結果、アミノ酸の光物性はその種の特徴となる側鎖よりアミノ酸全体に共通する主鎖の構造により強く依存し、波長帯としてライマン α 帯が重要であることを明らかにした。さらに、D 型アミノ酸が光分解を起こす励起状態を突き止め、その解離ポテンシャルと解離反応経路を同定した。

4. 研究業績

【競争的資金獲得状況】

<代表者>

- ・基盤研究 (S) : 梅村 雅之 (代表者) (継続)
「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」 (1,240 万円)
- ・基盤研究 (A) : 森 正夫 (代表者) (継続)
「理論と観測の融合による銀河発生学の探求」 (560 万円)
- ・挑戦的萌芽研究 : 吉川 耕司 (代表者) (継続)
「6 次元ボルツマン方程式による自己重力系の数値シミュレーション」 (90 万円)
- ・プレ戦略イニシアティブ : 森 正夫 (代表者) (新規)
「アクセラレータによる銀河輻射流体力学の幕開け」 (500 万円)
- ・研究活動スタート支援 : 川勝 望 (代表者) (新規)
「多階層連結モデルによる超巨大ブラックホール形成と進化の解明」 (133 万円)

<分担者>

- ・基盤研究 (A) : 梅村雅之 (分担者) (代表者: 大内正巳) (新規)
「次世代大規模探索とシミュレーションで挑む宇宙再電離」 (2.5 万円)
- ・基盤研究 (A) : 森 正夫 (分担者) (代表者: 大内正巳) (新規)
「次世代大規模探索とシミュレーションで挑む宇宙再電離」 (2.5 万円)
- ・基盤研究 (C) : 川口 俊宏 (分担者) (代表者: 峰崎 岳夫) (継続)
「活動銀河核多波長モニターデータベースと活動銀河核変光・放射機構の研究」 (10 万円)
- ・挑戦的萌芽研究: 川勝 望 (分担者) (代表者: 長尾透) (新規)
「宇宙の「生きた化石」: 現在の宇宙に潜む進化最初期の銀河と巨大ブラックホールの探索」 (15 万円)

【学位論文】

<修士論文>

1. 遠藤 圭介
銀河中心ブラックホールからの輻射力による星間ダストガス雲の力学進化
2. 田中 賢
GPU を用いた輻射輸送方程式数値シミュレーション

<学士論文>

1. 大塚 拓也
星の種族合成モデルを用いたブルーコンパクト矮小銀河の星形成史の解析
2. 大山 裕介
無衝突ボルツマン方程式を用いた球対称ダークマターハローの数値計算
3. 桐原 崇亘
Numerical simulations of the Andromeda stellar stream
4. 鈴木 裕行
原始銀河形成の流体シミュレーション
5. 柳本 万智子
シュバルツシルト時空中の力学
6. 山井 勇樹
原始銀河ガス雲におけるブラックホールの力学進化
7. 我妻 徹
アンドロメダ銀河の質量に関する研究

【論文】

Refereed Papers

1. Akahori, T., Yoshikawa, K., 2011, Non-Equilibrium Ionization State and

Two-Temperature Structure in the Bullet Cluster 1E0657-56, Populations, Publ. Astron. Soc. Japan, in press

2. Doi, A., Nagira, H., Kawakatu, N., Kino, M., Nagai, H., Asada, K., Radio Galaxies in narrow-line Seyfert 1 galaxies, *Astrophysical Journal*, submitted
3. Godet, O., Plazolles, B., Kawaguchi, T., Lasota, J.-P. , Barret, D., Farrell, S. , Braito, V. , Servillat, M. , Webb, N. , Gehrels, N. Investigating slim disk solutions for HLX-1 in ESO 243-49, *Astrophysical Journal*, in press (arXiv:1204.3461)
4. Hartquist, T. W., Wagner, A. Y., Falle, S. A. E. G., Pittard, J. M., & Van Loo, S. 2011, Cosmic rays and radiative instabilities, *Memorie della Societa Astronomica Italiana*, 82, 836-841
5. Ito, H., Kino, M., Kawakatu, N., Yamada, S., 2011, Evolution of Non-Thermal Emission from Shell Associated with AGN Jets, *Astrophysical Journal*, 270, 120-131
6. Kawaguchi, T., Mori, M. 2011, Near-Infrared Reverberation by Dusty Clumpy Tori in Active Galactic Nuclei, *Astrophysical Journal*, 737, 105-119
7. Kawakatu, N., Ohsuga, K. 2011, New Method for Exploring Super-Eddington AGNs by Near-infrared Observations, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 417, 2562-2570
8. Kino, M. , Kawakatu, N. , Takahara, F., 2012, Calorimetry of AGN jets: Testing Plasma Composition in Cygnus A, *Astrophysical Journal*, in press
9. Matsuda, Y., Yamada, T., Hayashino, T., Yamauchi, R., Nakamura, Y., Morimoto, N., Ouchi, M., Ono, Y., Kousai, K., Nakamura, E., Horie, M., Fujii, T., Umemura, M., Mori, M., 2011, The Subaru Ly α blob survey: a sample of 100-kpc Ly α blobs at $z=3$, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 410, L13-L17
10. Matsui, H., Saitoh, T. R., Makino, J., Wada, K., Tomisaka, K., Kokubo, E., Daisaka, H., Okamoto, T., and Yoshida, N., 2012, Origin of Multiple Nuclei in Ultraluminous Infrared Galaxies, *Astrophysical Journal*, 746, 26
11. Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., Saito, Y., Rich, M. 2012, Hunting a Wandering Black Hole in M31 Halo: Hermitage of Black Hole, *Astrophysical Journal Letters*, submitted
12. Miki, Y., Takahashi, D., Mori, M., 2012, A Fast Implementation and Performance Analysis of Collisionless N-body Code Based on GPGPU, *International Conference on Computational Science, ICCS 2012*, in press
13. Namekata, D., Habe, A., 2011, Evolution of a Nuclear Gas Disk and Gas Supply to the Galactic Center. I. Migration of Massive Gas Clumps, *Astrophysical Journal*, 731, 57-74
14. Ogiya, G., and Mori, M., 2011, The Core-Cusp Problem in Cold Dark Matter

Halos and Supernova Feedback: Effects of Mass Loss, *Astrophysical Journal Letters*, 736, L2(5pp)

15. Okamoto, T., Yoshikawa, K., and Umemura, M., 2012, ARGOT: accelerated radiative transfer on grids using oct-tree, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 419, 2855-2866

16. Okamoto, T., 2012, The origin of pseudobulges in cosmological simulations of galaxy formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, submitted (arXiv:1203.5372)

17. Parry, O. H., Eke, V. R., Frenk, C. S., and Okamoto, T., 2012, The baryons in the Milky Way satellites, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 419, 3304-3318

18. Prokhorov, D. A., Dubois, Y., Nagataki, S., Akahori, T., Yoshikawa, K., 2011, Unveiling the 3D temperature structure of galaxy clusters by means of the thermal Sunyaev-Zel'dovich effect, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 415, 2505-2512

19. Prokhorov, D. A., Colafrancesco, S., Akahori, T., Yoshikawa, K., Nagataki, S., Seon, K.-I., 2011, Can electron distribution functions be derived through the Sunyaev-Zel'dovich effect?, *Astronomy & Astrophysics*, 529, A39

20. Prokhorov, D. A., Colafrancesco, S., Akahori, T., Million, E. T., Nagataki, S., Yoshikawa, K., 2011, A high-frequency study of the Sunyaev-Zel'dovich effect morphology in galaxy clusters, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 416, 302-310

21. Scannapieco, C., Wadepuhl, M., Parry, O. H., Navarro, J. F., Jenkins, A., Springel, V., Teyssier, R., Carlson, E., Couchman, H. M. P., Crain, R. A., Dalla Vecchia, C., Frenk, C. S., Kobayashi, C., Monaco, P., Murante, G., Okamoto, T., Quinn, T., Schaye, J., Stinson, G. S., Theuns, T., Wadsley, J., White, S. D. M., and Woods, R., 2011, The Aquila comparison Project: The Effects of Feedback and Numerical Methods on Simulations of Galaxy Formation”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, submitted (arXiv:1112.0315)

22. Scannapieco, C., Wadepuhl, M., Parry, O. H., Navarro, J. F., Jenkins, A., Springel, V., Teyssier, R., Carlson, E., Couchman, H. M. P., Crain, R. A., Dalla Vecchia, C., Frenk, C. S., Kobayashi, C., Monaco, P., Murante, G., Okamoto, T., Quinn, T., Schaye, J., Stinson, G. S., Theuns, T., Wadsley, J., White, S. D. M., and Woods, R., 2011, The Aquila comparison Project: The Effects of Feedback and Numerical Methods on Simulations of Galaxy Formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, in

press (arXiv:1112.0315)

23. Shimizu, I., Yoshida, N., and Okamoto, T., 2011, Sub-millimetre galaxies in cosmological hydrodynamic simulations: Source number counts and the spatial clustering, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, submitted
24. Shimizu, I., Yoshida, N., and Okamoto, T., 2011, Lyman α emitters in cosmological simulations - I. Lyman α escape fraction and statistical properties at $z=3.1$, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 418, 2273-2282
25. Tanikawa, A., Yoshikawa, K., Okamoto, T., Nitadori, K., 2012, N-body simulation for self-gravitating collisional systems with a new SIMD instruction set extension to the x86 architecture, *Advanced Vector eXtensions, New Astronomy*, 17, 82-92
26. Tanikawa, A., Hut, P., Makino, J. 2012, Unexpected Formation Modes of the First Hard Binary in Core Collapse, *New Astronomy*, 17, 272-280
27. Tanikawa, A., Umemura, M., 2011, Successive Merger of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, *Astrophysical Journal* 728, L31-L36
28. Tsuchiya, M., Mori, M., Nitta, S., 2012, Transonic solutions of isothermal galactic winds in a cold dark matter halo, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, submitted
29. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., 2012, Sub-millimetre brightness of early star-forming galaxies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, in press
30. Yamada, T., Nakamura, Y., Matsuda, Y., Hayashino, T., Yamauchi, R., Morimoto, N., Kousai, K., Umemura, M., 2012, Panoramic Survey of Lyman α Emitters at $z=3.1$, *The Astrophysical Journal*, in press
31. Yamaoka, K., Allured, R., Kaaret, P., Kennea, J.A., Kawaguchi, T., Ghandi, P., Shaposhnikov, N., Ueda, Y., Nakahira, S., Kotani, T., Negoro, H., Takahashi, I., Yoshida, A., Kawai, N., 2012, RXTE Follow-up Observations of the Black Hole Candidate MAXI J1659-152 Discovered by MAXI and Swift, *Publ. Astron. Soc. Japan*, 64, 32 [15 pages]

Non-Refereed Papers

1. Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., Rich, M.R., 2012, Interaction between M31 and the Progenitor Dwarf Galaxy of the Andromeda Stellar Stream, *Astronomical Society of the Pacific (ASP) Conference Series*, in press
2. Saitoh, T. R., Daisaka, H., Kokubo, E., Makino, J., Okamoto, T., Tomisaka, K., Wada, K., and Yoshida, N., 2011, "Shock-induced star cluster formation in colliding galaxies", *Computational Star Formation, Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium 270*, eds. Joao Alves, Bruce G. Elmegreen, Josep

M. Girart, Virginia Trimble, 270, 483-486

3. Ogiya, G., and Mori, M., 2012, The Core-Cusp problem in CDM halos and supernova feedback, Astronomical Society of the Pacific (ASP) Conference Series, in press

【著書】

1. 梅村雅之（共著），岩波講座 計算科学 第2巻「計算と宇宙」

【解説記事】

1. 岡本崇，主役はどちら？ 銀河と共に育つ超巨大ブラックホール，科学（岩波書店），2011, Vol. 81 No. 4, 330-340

【集中講義】

1. 梅村 雅之：

輻射輸送・輻射流体サマースクール 2011（2011 年 8 月 18 日～20 日，北海道大学，札幌市）

2. 梅村 雅之：千葉大学

輻射輸送・輻射流体力学（2011 年 10 月 31 日，千葉大学，千葉市）

【研究会開催】

1. 初代星形成・初代銀河研究会

2011 年 12 月 20 日～22 日，九州大学，福岡市

2. ワークショップ 「巨大ブラックホールの起源」

2012 年 2 月 24 日～25 日，筑波大学，つくば市

3. ミニワークショップ 「Astrophysical GPU Mini-workshop in University of Aizu」

2012 年 2 月 17 日 会津大学

【座長】

1. 川勝望

日本天文学会"活動銀河核"日本天文学会春季年会，龍谷大学，2012 年 3 月 19 日～22 日

【国際会議発表・海外講演】

1. Okamoto T., 2011, Cosmological Disk Galaxy Formation, Galaxies in the Dark, (July 31 - August 4, 2011, Cafayate Salta, Argentina) (Invited)

2. Tanikawa, A., Successive Merger of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, Single and Double Black Holes in Galaxies, Aug 22-25, 2011, Michigan, USA)

3. Kawakatu, N., Wada, K., Growth of supermassive BHs and mass supply processes from galaxies, Starburst-AGN Connection under the Multiwavelength Limelight (Sep.14-16, 2011, Madrid, Spain)
4. Kawaguchi, T. and Mori, M., Near-Infrared Emission from Dusty Clumpy Tori in AGNs, Through the Infrared Looking Glass (October 3-5, 2011, Pasadena, USA)
5. Kawaguchi, T., Near-Infrared Emission from Dusty Clumpy Tori in AGNs, Seminar talk at UCSB (October 7, 2011, Santa Barbara, USA)
6. Ogiya, G., and Mori, M., The Core-Cusp problem in CDM halos and supernova feedback, The 3rd Subaru International Conference, The 1st NAOJ Symposium "Galactic Archaeology - Near-Field Cosmology and the Formation of the Milky Way" (Nov 1-4, 2011, Shuzenji, Japan)
7. Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., Rich, R. M., Interaction between M31 and the Progenitor Dwarf Galaxy of the Andromeda Stellar Stream, The 3rd Subaru International Conference, The 1st NAOJ Symposium "Galactic Archaeology - Near-Field Cosmology and the Formation of the Milky Way" (Nov 1-4, 2011, Shuzenji, Japan)
8. Kawakatu, N., AGN Outflow/Inflow with SKA, Workshop on East-Asian Collaboration for SKA (Nov.30-Dec.2, 2011, Daejeon, Korea) (Invited)
9. Ito, H., Kino, M., Kawakatu, N., Emission from Shells Associated with Dying Radio Sources, Workshop on East-Asian Collaboration for SKA (Nov.30-Dec.2, 2011, Daejeon, Korea)
10. Tanikawa, A., Unexpected Formation Modes of the First Hard Binary in Core Collapse, MODEST-11 (Dec 12-16, 2011, Leiden, Netherland)
11. Kawaguchi, T. and Mori, M., Near-Infrared Emission from Dusty Clumpy Tori in AGNs, Growing black holes in COSMOS (February 13-14, 2012, IPMU (Tokyo U), Kashiwa, Japan)
12. Kawakatu, N., Coevolution Model of SMBHs and Nuclear Starbursts, Colloquium of Astronomy Program at SNU (March 8, 2012, Seoul, Korea)
13. Miki, Y., Mori, M., and Kawaguchi, T., Suppression of Black Hole Activity due to Galactic Merger, The 5th Korea-Japan Young Astronomers, Meeting (February 22-24, 2012, Seoul, Korea)

【国内講演】

<招待講演>

1. 川口俊宏, 「活動銀河核のダストトラース」, 談話会 (2011 年 6 月 10 日, 名古屋大学, 名古屋市)

2. 岡本崇, 「銀河形成シミュレーション」, 滞在型研究会「全天体形成」(2011 年 8 月 1~31 日, 北海道大学, 札幌市)
3. 吉川耕司, 「無衝突ボルツマン方程式の直接数値計算による無衝突自己重力系の数値シミュレーション」, 滞在型研究会「全天体形成」(2011 年 8 月 1~31 日, 北海道大学, 札幌市)
4. 石山智明, 「大規模 N 体シミュレーションの未来」, 滞在型研究会: 全天体形成(2011 年 8 月 1~31 日, 北海道大学, 札幌市)
5. 川口俊宏, 「活動銀河核のダストトールス」, 滞在型研究会「全天体形成」コンパクト天体・活動銀河セッション, (2011 年 8 月 4 日, 北海道大学, 札幌市)
6. 川勝 望, 白川友紀, 本多正尚, 戸田さゆり, 「筑波大学「理数学生応援プロジェクト」と大学での科学教育」, 日本科学教育学会 (2011 年 8 月 23 日~25 日, 東京工業大学, 横浜)
7. 川口俊宏, 「TMT の高空間分解能で探る活動銀河核の feeding, feedback, coevolution」, 「TMT サイエンス検討報告会: 日本独自のサイエンス提案とその実現のために」会議 (2011 年 9 月 5 日, 京都大学, 京都市)
8. 川口俊宏, 「活動銀河核のダストトールス」, 談話会 (2011 年 10 月 18 日, 東北大学, 仙台市)
9. 岡本崇, CDM 宇宙での pseudo-bulge の形成, JASMINE サイエンスワークショップ (2011 年 11 月 10 日~12 日, 北海道支笏湖)
10. 梅村雅之, 「AGN サーベイによるサイエンスの展望」, HSC 活動銀河核探査によるサイエンス (2011 年 11 月 16 日~18 日, 京都大学, 京都市)
11. 川口俊宏, 「Luminosity and mass functions through HSC data」, HSC 活動銀河核探査によるサイエンス (2011 年 11 月 16 日~18 日, 京都大学, 京都市)
12. 石山智明, 「準解析的モデルで用いる N 体シミュレーションの詳細」, HSC 活動銀河核探査によるサイエンス (2011 年 11 月 16 日~18 日, 京都大学, 京都市)
13. 川口俊宏, 「活動銀河核のダストトールス」, 談話会 (2012 年 1 月 23 日, 広島大学, 東広島市)
14. 川口俊宏, 「活動銀河核のダストトールス」, 談話会 (2012 年 2 月 9 日, 信州大学, 松本市)
15. 石山智明, 「スーパーコンピュータ"京"による, 天文シミュレーション」, 第 10 回 HSS ワークショップ「スーパーコンピュータ "京" でせまる最先端の科学・技術」(2012 年 2 月 17 日, 北海道大学, 札幌市)
16. 森正夫, 「アンドロメダの涙」, 国立天文台談話会 (2011 年 12 月 16 日, 国立天文台, 三鷹市)

<一般講演>

17. 谷川 衡, 「Unexpected Formation Modes of the First Hard Binary in Core Collapse」, MODEST-10c: Algorithms and Applications of gravitational N-body simulation, (2011 年 8 月 1 日～9 月 17 日, 神戸大学, 神戸市)
18. 梅村 雅之, 「初代星形成の輻射流体力学」, 輻射輸送・輻射流体サマースクール 2011 (2011 年 8 月 18 日～20 日, 北海道大学, 札幌市)
19. 森正夫, 「アンドロメダの涙とさざめき」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
20. 吉川 耕司, 谷川 衡, 似鳥 啓吾, 岡本 崇, 「新しい SIMD 拡張命令セット Advanced Vector eXtensions を用いた高性能無衝突系 N 体計算ライブラリの開発」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
21. 川口 俊宏, 森正夫, 「活動銀河核の光と影: ダストトーラスの自己掩蔽」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
22. 三木 洋平, 森正夫, 川口 俊宏, 「銀河衝突の活動銀河中心核への影響: 活動抑制が起こる条件の導出」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
23. 扇谷 豪, 森正夫, 「ダークマターハローの周期的バリオン重力場変動への力学応答」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
24. 土屋 聖海, 森正夫, 新田 伸也, 「球対称定常銀河風の遷音速解: 銀河の質量密度分布との関係」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
25. 桐原 崇亘, 三木 洋平, 森正夫, 「アンドロメダストリームとダークマターハローの外縁構造の解析」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
26. 済藤 祐理子, 三木 洋平, 川口 俊宏, 森正夫, 「Detectability of the Wandering Black hole in M31 Halo」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
27. 谷川 衡, 吉川 耕司, 岡本 崇, 似鳥 啓吾, 「新しい SIMD 拡張命令セット: Advanced Vector eXtensions を用いた衝突系 N 体シミュレーションコードの開発」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
28. 石山 智明, 牧野 淳一郎, Simon Portegies Zwart, Cosmogrid Project team, 「The Cosmogrid Simulation II: 異機種混合宇宙論的 N 体シミュレーション」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
29. 長谷川 賢二, Benoit Semelin, 「輻射流体計算で探る宇宙再電離」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
30. 行方 大輔, 「磁場と FUV 加熱率が Central Molecular Zone の構造と星間ガスの統計的性質に与える影響」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日～22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)

31. 安部牧人, 久保田明夏, 梅村雅之, 米徳大輔, 「Swift GRB 光度曲線の性質について: (1) フーリエ&自己相関解析」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日~22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
32. 久保田明夏, 安倍牧人, 梅村雅之, 米徳大輔, 「Swift GRB 光度曲線の性質について: (2) 赤方偏移データを用いた統計解析」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日~22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
33. 川勝 望, 紀 基樹, 「LOFAR/SKA で探る活動銀河核ジェットからの熱的シンクロトロン放射」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日~22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
34. 紀 基樹, 伊藤 裕貴, 川勝 望, M. Orienti, 「電波ダークなミニ AGN シェル: 新しい TeV ガンマ線源の可能性」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日~22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
35. 伊藤 裕貴, 紀 基樹, 川勝 望, 「死んだ電波ローブを取り囲むシェルからの非熱的放射」, 日本天文学会秋季年会 (2011 年 9 月 19 日~22 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
36. 岡本崇, 「円盤銀河のバルジの形成過程」, 第 24 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学の革新」(2011 年 11 月 5~7 日, 国立天文台, 三鷹市)
37. 川口俊宏, 「活動銀河核ダストトーラスの近赤外線放射モデル」, 第 24 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学の革新」(2011 年 11 月 5~7 日, 国立天文台, 三鷹市)
38. 長谷川 賢二, Benoit Semelin, 「Self-regulated Reionization by Radiation-Hydrodynamic Simulations」, 第 24 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学の革新」(2011 年 11 月 5~7 日, 国立天文台, 三鷹市)
39. 谷川衝, 「新しい SIMD 拡張命令セット: Advanced Vector eXtensions を用いた衝突系 N 体シミュレーションコードの開発」, 第 24 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学の革新」(2011 年 11 月 5~7 日, 国立天文台, 三鷹市)
40. 行方大輔, 「磁場と星間輻射場が Central Molecular Zone における星形成率に与える影響」第 24 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学の革新」(2011 年 11 月 5~7 日, 国立天文台, 三鷹市)
41. Wagner Alexander, 「Hydrodynamic simulations of relativistic AGN jet feedback」, 第 24 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学の革新」(2011 年 11 月 5~7 日, 国立天文台, 三鷹市)
42. 谷川衝, 「巨大ブラックホール多体系でのブラックホール合体成長に伴う銀河中心構造の進化」, JASMINE サイエンスワークショップ (2011 年 11 月 10 日~12 日, 北海道支笏湖)
43. 梅村雅之, 「小型 JASMINE によるサイエンス (まとめ)」, JASMINE サイエンスワークショップ (2011 年 11 月 10 日~12 日, 北海道支笏湖)
44. 川勝 望, 「超巨大ブラックホール進化モデルの現状と今後の課題」, HSC 活動銀河

核探査によるサイエンス (2011 年 11 月 16 日～18 日, 京都大学, 京都市)

45. 峰崎岳夫, 坂田悠, 諸隈智貴, 小久保, 越田進太郎, 鮫島寛明, 川口俊宏, 「活動銀河核変光の紫外線可視放射の多波長相関」, HSC 活動銀河核探査によるサイエンス (2011 年 11 月 16 日～18 日, 京都大学, 京都市)
46. 川口俊宏, 「活動銀河核ダストトーラスの構造」, 第 4 回キューサー吸収線研究会 (2011 年 12 月 11 日, 信州大学, 松本市)
47. 長谷川賢二, Benoit Semelin, 「三次元輻射流体計算で探る再電離期の宇宙」, 初代星形成・初代銀河研究会 (2011 年 12 月 20 日～22 日, 九州大学, 福岡市)
48. Wagner Alexander, 「AGN jet - ISM interactions in high redshift radio galaxies」, 初代星形成・初代銀河研究会 (2011 年 12 月 20 日～22 日, 九州大学, 福岡市)
49. 安部牧人, 久保田明夏, 梅村雅之, 米徳大輔, 「Swift GRB 光度曲線に基づく GRB の z の決定および GRB 光度曲線の性質について」, 初代星形成・初代銀河研究会 (2011 年 12 月 20 日～22 日, 九州大学, 福岡市)
50. 梅村雅之, 「研究会サマリ」, 初代星形成・初代銀河研究会 (2011 年 12 月 20 日～22 日, 九州大学, 福岡市)
51. 石山智明, 「ダークマターハローの中のサブハロー分布」, 2011 年度国立天文台天文シミュレーションプロジェクト・ユーザズミーティング (2012 年 1 月 17 日～18 日, 国立天文台, 三鷹市)
52. 佐藤皓允, 庄司光男, 神谷克政, 梅村雅之, 矢花一浩, 白石賢二, 「星間空間におけるアミノ酸キラリティ生成機構の理論的研究」, ALMA ワークショップ (宇宙と生命) (2012 年 1 月 21 日, 国立天文台, 三鷹市)
53. 三木洋平, 「GPGPU による無衝突系 N 体計算の高速化」, Astrophysical GPU Mini-workshop in University of Aizu (2012 年 2 月 17 日, 会津大学, 会津市)
54. 梅村雅之, 「銀河スケールからの巨大 BH 形成理論の構築に向けて」, ワークショップ 「巨大ブラックホールの起源」 (2012 年 2 月 24 日～25 日, 筑波大学, つくば市)
55. 川口俊宏, 三木洋平, 森正夫, 「銀河衝突に伴う巨大ブラックホールの進化」, ワークショップ 「巨大ブラックホールの起源」 (2012 年 2 月 24 日～25 日, 筑波大学, つくば市)
56. 川勝望, 和田桂一 「超巨大 BH と銀河の共進化モデル構築へ向けて」, ワークショップ 「巨大ブラックホールの起源」 (2012 年 2 月 24 日～25 日, 筑波大学, つくば市)
57. 尾崎忍夫, 宮崎聡, 山下卓也, 田中陽子, 服部堯, 岡田則夫, 三ツ井健司, 福岡美津広, 川口俊宏, 松田有一, 斎藤智樹 「Development of FOCAS IFU」, すばるユーザズミーティング (2012 年 2 月 28～3 月 1 日, 国立天文台, 三鷹市)
58. 川口俊宏, 森正夫, 「ダストトーラスと降着円盤の軸不一致が引き起こす放射特性」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)
59. 森正夫, 桐原崇亘, 三木洋平, 川口俊宏, 濟藤祐理子, Rich, M.R., 「アンドロメダの

リングと涙」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

60. 濟藤祐理子, 諸隈智貴, 峰崎岳夫, 川勝望, 川口俊宏, 長尾透, 松岡健太, 今西昌俊, 美濃和陽典, 大井渚, 今瀬佳介, 「Cosmological Evolution of SMBH mass-Bulge mass Relation investigated by SDSS QSOs at $z \sim 3$ 」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

61. 小田寛, 川口俊宏, 「光学的に薄い磁気圧優勢二温度降着円盤モデルの明るい Hard-to-Soft 遷移への適用」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

62. 佐藤皓允, 庄司光男, 神谷克政, 梅村雅之, 矢花一浩, 白石賢二, 「星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰の理論的研究」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

63. 桐原崇亘, 森正夫, 「アンドロメダストリームの非対称構造」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

64. 岡本崇, 「宇宙論的 pseudobulge 形成」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

65. 川勝 望, 和田桂一, 「銀河からのガス供給過程の多様性と超巨大ブラックホール成長との関係」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

66. 土居明広, 柳楽央至, 川勝望, 紀基樹, 永井洋, 浅田桂一 「狭輝線セイファート 1 型銀河の電波銀河の発見」, 日本天文学会春季年会 (2012 年 3 月 19 日～22 日, 龍谷大学, 京都市)

5. 連携・社会貢献、その他

【計算科学研究センター内異分野間連携】

星間空間円偏光波による L 型アミノ酸過剰の研究において, 宇宙・生命・物性・原子核分野連携を行い, 2012 年日本天文学会春季年会にて成果発表を行った。(地球惑星科学連合大会 (2012 年 5 月) においても発表予定。)

【社会貢献】

1. 日本天文学会公開講演会／全国同時七夕講演会
「宇宙探求への道」

2011 年 7 月 3 日(日) 14:00-17:00 (つくば国際会議場エポカル)

2. 日本天文学会 2011 年春季年会 記者会見

2011 年 6 月 13 日(月) 14-16 時 (国立天文台) 梅村雅之, 谷川衝
「合体で巨大化するブラックホール」

「高精度シミュレーションが解き明かす巨大ブラックホールの謎」

3. 第 12 回 林忠四郎記念講演会

2012 年 1 月 17 日(火) 15:30-18:00 (筑波大学 大学会館 国際会議室)

4. SSH 生徒研究発表会 2011 (神戸国際展示場, 神戸市)

2011 年 8 月 10 日～12 日 川勝望

SSH 指定校の高校生に対して, 理数学生応援プロジェクトの広報を行った。

5. 春の進学説明会・模擬授業 2012 (筑波大学 東京キャンパス文京校舎, 文京区)

2012 年 3 月 28 日～30 日 川勝望

理数学生応援プロジェクト参加学生による研究発表のポスター展示とプログラムの説明を行った。

II-2. 原子核分野

1. メンバー

教授 矢花 一浩

講師 橋本 幸男

准教授 寺崎 順 (HPCI 戦略プログラム分野5)

2. 概要

当グループは、フェルミオン多粒子系のダイナミクスに対する計算科学的アプローチ、特に時間依存密度汎関数理論を主要な方法論として、原子核物理から物質科学、光科学にわたる広範な分野にわたる研究を展開している。

原子核物理学では、陽子と中性子の多体系として捉えた原子核、特に陽子数と中性子数が異なる不安定原子核に対し、励起・応答・反応などの量子ダイナミクスに関する研究を進めている。不安定原子核の構造と反応は、星の構造や元素の起源をめぐる宇宙物理学に密接に関連しており、中長期的に宇宙分野と連携した活動を発展させたいと考えている。本年度より寺崎准教授が加わり(HPCI 戦略プログラム分野5による雇用)、原子核応答に関する研究が強化された。

当グループではまた、原子核物理学と共通する方法論を用い、物質科学分野において電子ダイナミクスの第一原理量子シミュレーション計算による研究を展開している。本年の主要な成果として、光と物質の相互作用を第一原理から記述する新たな枠組みである、マクスウェル+TDDFT マルチスケール・シミュレーション法の開発に成功したことを挙げることができる。これは、近年光科学分野で発展が著しい高強度超短パルスレーザーを用いた研究に密度汎関数理論に基づく第一原理計算を導入するものであり、今後様々な現象への応用を計画している。

3. 研究成果

【1】時間依存密度汎関数理論による物質中の電子ダイナミクス計算

(1) 高強度パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理マルチスケール・シミュレータの開発(矢花、杉山、篠原、乙部(原研)、G.F. Bertsch(Univ. Washington))

光とバルク物質の相互作用は、通常は巨視的マクスウェル方程式で記述され、物質の性質は誘電率などの線形感受率を通して反映される。ところが近年発展の著しい高強度超短パルス光と物質の相互作用では、強い光電場が引き起こす非線形電子ダイナミクスのために、もはや巨視的電磁場のダイナミクスと電子のダイナミクスを分離することができず、マクスウェル方程式と時間依存シュレディンガー方程式を結合して解くことが必要とされる状況にある。また、可視光領域の光の波長が μm 程度であるのに対し光電場が誘起する電子ダイナミクスの空間スケールは原子サイズと同程度の nm 以下であることから、これはマルチスケールの問題である。

本年度我々は、電子ダイナミクスに対して時間依存密度汎関数理論を用い、電子の運動を記述する時間依存コーン・シャム方程式と巨視的光電磁場の運動を記述するマクスウェル方程式を結合して同

時に解き進める、マルチスケール・シミュレーションに取り組み、その定式化に成功し、最も単純な、バルク物質 (Si 結晶) に直線偏光パルスが垂直に入射する場合について計算を行った (K. Yabana et.al, Phys. Rev. B85, 045134 (2012))。この枠組みは、弱い光電場の場合には電子ダイナミクスに摂動論を用いることで通常の誘電関数を用いた巨視的マクスウェル方程式に帰着するため、通常物質中の電磁気学を包含するものとなっている。

本枠組みは、巨視的電磁場を記述する各巨視的格子点において微視的電子ダイナミクスを計算するというマルチスケール計算であることから、極めて大規模な超並列計算が必要となる。本年行った1次元的な光伝播では1,000コアを用いて10時間程度の計算であるが、例えばカー効果による光の自己収束やフィラメンテーションなどの興味深い非線形光学現象を記述するには2-3次元の電磁波ダイナミクスを計算する必要がある。これには10万コア以上を用いた超大規模計算の遂行が必要となるため、現在京コンピュータを用いた高効率な大規模計算に取り組んでいる。巨視的格子点に関する隣接コア間の通信量は、ベクトルポテンシャルとカレントのみ (合わせて高々48バイト) であるため、本計算コードは極めて高効率な並列化が可能となる。実際これまで行った30,000コア程度の計算においても通信コストは僅かであり、実効効率も20%程度の比較的良好な数値となることが確認されている。また、HA-PACSを用いたマルチGPU計算も予定しており、微視的電子ダイナミクスに対するGPUコードは作成済みであり、1CPUコアと比較して15倍程度の加速を確認している。今後、巨視的格子点に関しマルチGPU並列化を行った計算を予定している。

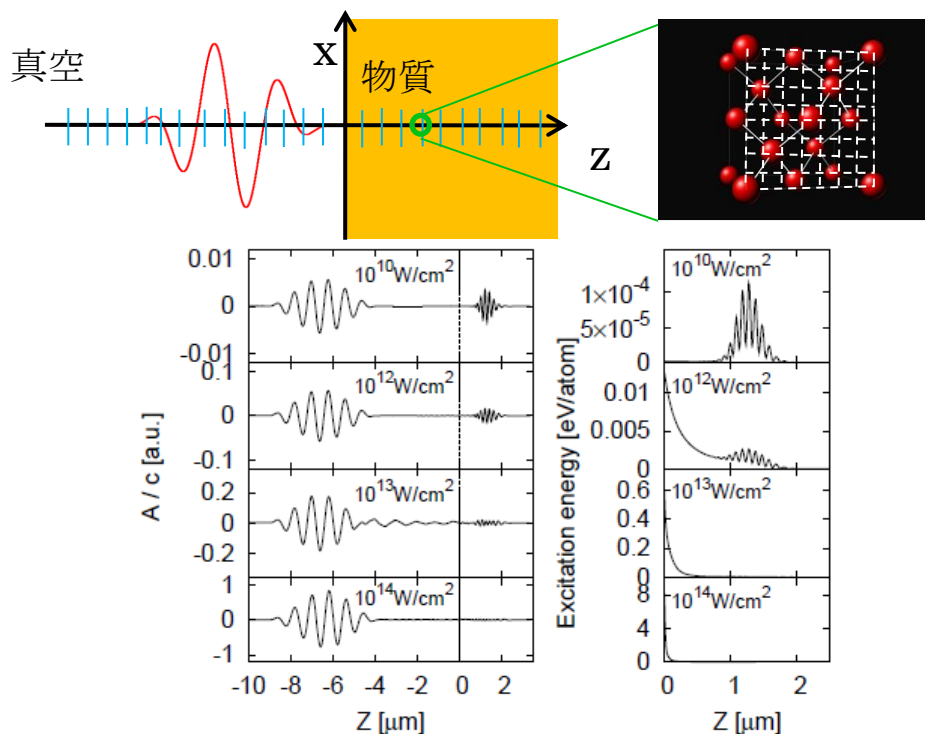


図1: (上) マルチスケール計算の模式図。巨視的電磁場を記述する物質中の各巨視的格子点毎に、結晶の単位胞を考え、微視的格子点を用いて電子ダイナミクスの計算を行う。(下) バルク Si にパルス光が入射した場合の光電場

の様子と、物質内での電子励起エネルギーの分布。

(2) コヒーレントフォノンの生成機構に対する時間依存密度汎関数理論による研究(篠原、矢花、乙部(原研)、G.F. Bertsch(Univ. Washington))

固体中の光学フォノンの振動数に比べてパルス長の短い超短パルスレーザーを照射した際に起こる現象の一つにコヒーレントフォノンがある。我々は、時間依存密度汎関数理論に基づき、第一原理からコヒーレントフォノンの生成起源を解明することを試みた。これまで Si に対する解析を進め、パルス光の中心振動数と直接バンドギャップとの大小により、瞬間的誘導ラマン機構、及び共鳴ラマン機構・核平衡位置の変化による変位機構が定量的に記述されることを明らかにしてきた。

コヒーレントフォノンの実験的測定は、Sb/Bi 等の半金属物質に対して数多く行われており、本年は Sb に対する計算を進めた。実験的には、2つの光学フォノンモード(A_{1g} と E_g モード)に対して、異なる機構(瞬間誘導ラマン型と実励起型)が混在することが報告されているが、これまでの予備的解析では両方のモードに対して実励起型という結果となっている。

(3) PAW 法を用いたアト秒電子ダイナミクスの記述(佐藤、杉山、篠原、矢花)

パルス光による超高速測定の前線は、アト秒 X 線パルスを用いたアト秒(10^{-18} s)スケールの実時間計測に広がっている。この時間スケールは、古典原子モデルでの水素原子の電子軌道周期である1原子単位に相当しており、電子波束ダイナミクスの実時間計測を目指した実験研究が進展している。これらの実験研究では内殻電子の励起が観測の対象となっており、内殻電子の実時間ダイナミクスを記述することができる理論計算の枠組みが必要とされている。

従来我々が発展させてきた実時間・実空間計算法では擬ポテンシャルを用いているため、そのままでは内殻電子のダイナミクスを記述することができない。実空間格子表現を用いて内殻電子の波動関数を記述することができる理論として、PAW 法(Projector Augmented Wave method)が知られており、本年度この方法を我々の計算コードに導入した。試験的な計算として、簡単な分子の内殻励起(X 線吸収)スペクトルに対する実時間線形応答計算を行い、従来行われていた連分数展開によるスペクトルの計算結果と一致することを確認した。現在、原子に対するフェムト秒パルスとアト秒パルスのポンプ・プローブ実験に対応する計算の検討を進めている。

【2】原子核の励起に対する時間依存平均場理論

(1) Gogny 力を用いた時間依存平均場計算(橋本)

時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov (TDHFB) は Skyrme 型有効核力を利用して計算が実行される場合が多い。われわれは、Gogny 型相互作用を利用した TDHFB 計算を進めてきた。そこでは、Gogny 型有効相互作用を用いた場合には基底空間のカットオフが自然に導入される点を利用している。数値計算のコードは調和振動子基底を用いている。現在は、線形応答計算と非線形緩和現象についての計算を進めている。

線形応答計算では、酸素からチタンなどの比較的小さな核の領域を対象にアイソベクトル型双極子

振動とアイソスカラー型四重極振動の強度関数を蓄積している。これは、対相関を含めたより実際的な励起スペクトルの系統的な計算につながるものである。より重い核の領域での系統的な計算に向けて、矢花・寺崎両氏の協力を得て数値計算コードの改良を進めている。

非線形領域では、時間に依存した対相関の効果が平均場の軌道の占有確率を変化させて複雑な振動運動が生じる。この計算は、調和振動子基底の範囲で、準位交差を含む大振幅振動運動の小規模なシミュレーションに相当する。 ^{44}Ti と ^{52}Ti についての計算からは、大振幅の振動運動は、大きく2種類に分類できると思われる。ひとつは巨大共鳴に相当する小振幅振動を載せた長周期大振幅振動であり、この場合は核子軌道のエネルギー準位の交差点において軌道の占有確率が断熱的 (adiabatic) に変化する。他方は、典型的な振動周期よりもはるかに長い時定数を持つ緩和を伴う振動であり、そこでも対相関による軌道の占有確率の揺らぎが緩和を引き起こしている。これらの TDHFB 計算は、TFHF 計算 (TDHF+固定占有確率) とは異なるものである。

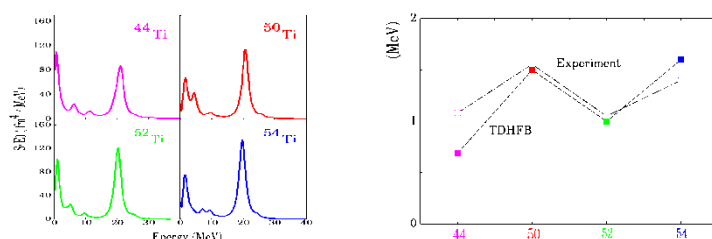
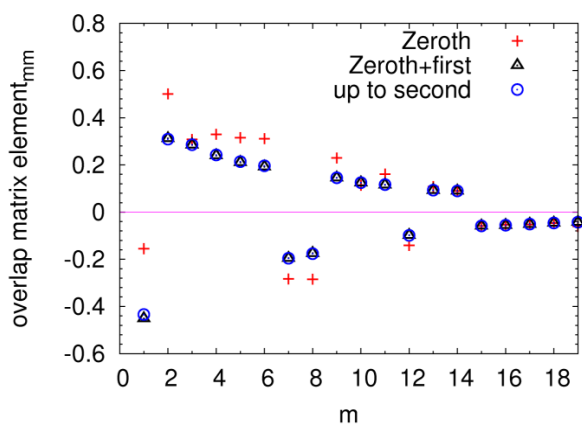


図2: チタン同位体 ($^{44,50,52,54}\text{Ti}$) のTDHFBによる強度関数 (左図) と 2^+ 低励起エネルギー (右図) の値。

(2) 二重ベータ崩壊行列要素の QRPA 計算 (寺崎)

寺崎は、ニュートリノ質量を決めるためのニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素を準粒子乱雑位相近似 (QRPA) を用いて計算することを目指しており、この課題は平成23年度ならびに平成24年度の科研費研究活動スタート支援に採択されている。今年度は、この計算に必要なふたつの QRPA 励起状態の重複を、今まで他の人々に用いてられてきた方法よりもずっと精密に計算する方法を開発した。寺崎は上記計算において、用いる 2 準粒子励起の切断が有効であること、QRPA 基底状態の生成子に関する展開が有効であることを見出した。QRPA 状態の式は複雑でそれをあらわに用いることは極力避けるのが QRPA 計算の常套的考えであったが、上記近似の有効性と数学的性質ならびに強力な並列計算機を用いれば、その考え方にこだわって計算精度を落とす必要はないということを示した点で、この研究は画期的である。用いた近似法の一つが厳密といって差し支えないくらい精度のよい結果を与えることが図に示されている。

図3: ^{26}Si と ^{26}Mg の QRPA 励起状態の重複の対角行列要素を絶対値の大きい順に並べたもの。用いられている近似は QRPA 生成子に関する exponential 関数の展開で、1次までで十分であることがわかる。



【3】原子核の反応

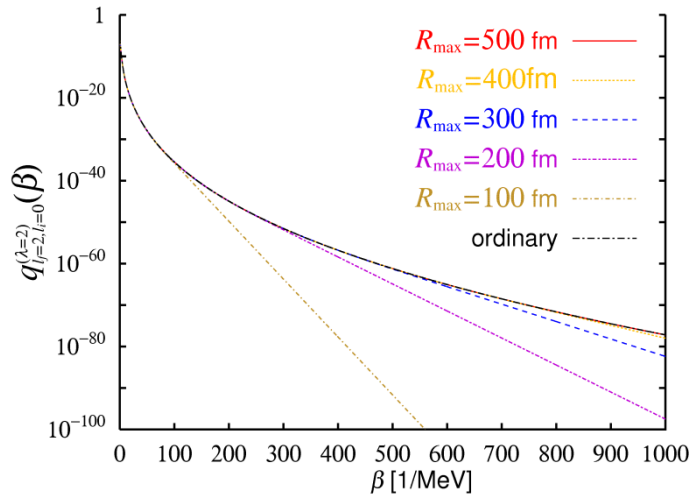
(1) 光捕獲反応率の新しい計算法(矢花、赤堀、船木(理研))

星の中で進む原子核合成は、光放出を伴う融合反応を伴う。電荷を持つ原子核どうしの反応ではクーロン障壁のために対応する断面積は指数関数的に小さく、直接的な測定は困難であるため、しばしば理論計算が重要な役割を果たす。なかでも 3α 反応による ^{12}C 核の合成は、重元素合成の起点となる重要な反応である。最近緒方(阪大 RCNP)らは、低温領域で重要となる共鳴状態を経ない直接融合反応の断面積を微視的な3体反応理論である CDCC 法を用いて計算し、従来用いられていたものと比べ 20 桁もの違いがあることを報告し、注目を集めている。

3α 融合反応は実験測定が不可能であるため理論による評価が極めて重要であるが、その理論計算は2つの点で困難を伴う。一つは、3つの電荷を持つ粒子の反応に関して、漸近領域における波動関数の解析形が知られておらず、従って散乱振幅(および断面積)に対する正確な定義が知られていないことである。もう一つは、クーロン障壁の存在のために、考慮する温度領域により光捕獲反応率は 10^{80} にも及ぶ変化を示すことである。このため、計算精度に対する極めて慎重な扱いが必要とされる。

我々は上述の困難を克服する枠組みとして、散乱問題を解くことなく直接温度の関数としての光捕獲反応率を計算することが可能な新たな理論である虚時間計算法を提案した。この方法では、光捕獲後の終状態(3α 反応では 2^+ 励起状態)から出発し、温度の逆数 $\beta = 1/kT$ に対する虚時間発展方程式を解くことで反応率を得ることが可能である。

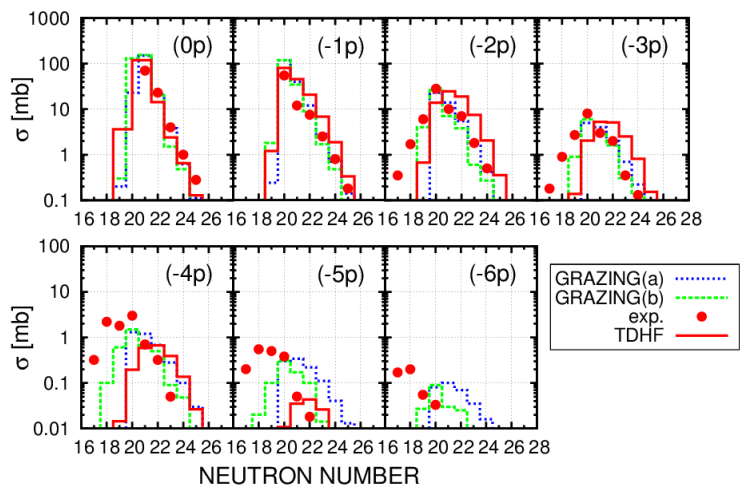
図4: α - ^{16}O 光捕獲反応率に対する計算。通常の計算法 (ordinary) と、様々な空間領域で得られた虚時間計算法との結果を比較している。この系では、500fm の空間で解くことにより、 1000MeV^{-1} (10^7K 程度) の温度領域まで収束した結果が得られている。



(2) 多核子移行反応の TDHF 計算 (関沢、矢花)

重イオン衝突反応で起こる多核子移行反応に対し、時間依存 Hartree-Fock (TDHF) 理論に基づく記述を試みた。最近、C. Simenel により提案された粒子数射影の方法を用い、入射エネルギー・入射パラメータ毎に、衝突後の TDHF 波動関数から核子移行確率を計算し、実験的測定がなされているいくつかの系と核子移行断面積の比較を行った。比較的少数の核子が移行する過程に対しては、TDHF は実験結果を一定の精度で再現するが、移行核子数が多い場合には断面積を過小評価するという結果が得られた。今後、励起状態にある TDHF 終状態波動関数からの核子放出(evaporation 効果)の検討を行う。また、KEK グループにより、多核子移行反応を用いた r 過程原子核の生成実験が検討されており、中性子過剰な不安定核を生成するにはどのような原子核対、入射エネルギーで反応を行うのが適当であるかについて、検討を行う予定である。

図5: ^{40}Ca - ^{124}Sn の衝突で起こる多核子移行反応に対する TDHF 計算の結果 (赤線) と実験結果 (赤丸) の比較。直接反応理論に基づく結果 (青・緑線、GRAZING コード) も示している。



4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Emergence of pygmy dipole resonances: Magic Numbers and neutron skins
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
Phys. Rev. C84, 021302 (2011).
2. Magnetic circular dichroism in real-time time-dependent density functional theory
K.-L. Lee, K. Yabana, G.F. Bertsch
J. Chem. Phys. 134, 144106 (2011).
3. Time-dependent density functional theory for strong electromagnetic fields in crystalline solids
K. Yabana, T. Sugiyama, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch
Phys. Rev. B85, 045134 (2012).
4. 光イオン化過程の時間依存密度汎関数理論による第一原理計算
矢花一浩
Journal of the Vacuum Society of Japan 54, 522 (2011).
5. Imaginary-time method for radiative capture reaction rate
K. Yabana, Y. Funaki
Phys. Rev. C, submitted, arXiv:1202.3309
6. Three dimensional structure of low-density nuclear matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
submitted to Phys. Lett. B
7. Toward a Microscopic Reaction Description Based on Energy-Density-Functional Structure Models,
G. P. A. Nobre, F. S. Dietrich, J. E. Escher, I. J. Thompson, M. Dupuis, J. Terasaki, and J. Engel,
Phys. Rev. C 84 (2011) 064609
8. Testing Skyrme Energy-Density Functionals with the QRPA in Low-Lying Vibrational States of
Rare-Earth
Nuclei
J. Terasaki and J. Engel,
Phys. Rev. C 84 (2011) 014332
9. Testing Skyrme Energy-Density Functionals with the QRPA in Low-lying Vibrational States of
Rare-Earth Nuclei
J. Terasaki
submitted to Progress of Theoretical Physics, Supplement.
10. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei”
J. Terasaki
in preparation.
11. Linear responses in time-dependent Hartree-Fock Bogoliubov Method with Gogny interaction
Y. Hashimoto,
submitted to Eur. Phys. Jour. A

(2) 学会発表

(A) 国際会議講演等

1. Time-dependent approaches for reactions at barrier energy

- K. Yabana
INT program INT-11-2d, Interface between Structure and Reactions for Rare Isotopes and Nuclear Astrophysics, INT, Univ. Washington, USA, Aug. 8- Sept. 2, 2011.
2. Real-time and real-space density functional calculation for electron dynamics in crystalline solids
K. Yabana
Int. Conf. on Computational Science, Nanyang Technological University, Singapore, Jun. 1-3, 2011.
 3. Real-time TDDFT Simulation for Ultrafast Electron Dynamics in Dielectrics
K. Yabana
14th International Conference Density Functional Theory in Chemistry, Physics and Biology, Athens, Greece, 2011 Aug. 29-Sep. 2
 4. Real-time TDDFT Calculation in Molecules and Solids
K. Yabana
ISTCP-VII (International Symposium on Theoretical Chemistry and Physics), Waseda Univ. Sept. 2-8, 2011.
 5. Real-Time TDDFT for Molecules and Solids
K. Yabana
Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei, YITP Kyoto Univ., Sept. 23, 2011.
 6. Time-Dependent Hartree-Fock Calculation for Multi-Nucleon Transfer Reactions
K. Yabana
YIPQS Long-term Workshop Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011) One-day Workshop4, Oct. 24, 2011.
 7. Time-dependent density functional theory for femtosecond electron dynamics in dielectrics
K. Yabana
The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Univ. Tokyo, Oct.31-Nov. 2, 2011.
 8. Time-Dependent Density Functional Theory for Intense Laser Pulse Propagation in Solids
K. Yabana
3rd Int. CQSE Workshop on Atomic, Molecular and Ultrafast Science and Technology, National Taiwan Univ., Jan. 7-8, 2012.
 9. Computational Approach for Dynamics of Many-Fermion Systems – from Nuclear Physics to Optical Science -
K. Yabana
Kyoto Univ. GCOE Symposium “Links among Hierarchies”, Feb. 13-15, 2012.
 10. Tests of Skyrme Energy Density Functionals in Low-Energy Vibrational States of Rare-Earth Nuclei using QRPA
J. Terasaki,
RIBF, ULIC and CNS Symposium on Frontier of Gamma-ray Spectroscopy, June 30 – July 2, 2011, RIKEN, Wako, Japan
 11. Testing Skyrme Energy-Density Functionals with the QRPA in Low-lying Vibrational States of Rare-Earth

- Nuclei
J. Terasaki
YKIS2011 Symposium Frontier Issues in Physics of Exotic Nuclei, Oct. 11-15, 2011, Kyoto Univ., Kyoto, Japan
12. Testing Skyrme energy-density functionals with the QRPA in low-lying vibrational states of rare-earth nuclei
J. Terasaki
1st Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure, Advances in Nuclear Structure with arrays including new scintillator detectors, Feb. 22-25, 2012, Bormio, Italy
13. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei
J. Terasaki
International Molecule "Nuclear forces and neutron-rich matter", March 1-31, 2012, Yukawa Institute of Theoretical Physics, Kyoto University.
14. Large-scale calculations of excited states of heavy nuclei
J. Terasaki
LBNL and CCS-Tsukuba Joint Workshop 2012, March 19-20, 2012, Center for Computational Sciences, University of Tsukuba
15. Gogny-TDHFB calculation of nonlinear vibrations in $^{44,52}\text{Ti}$,
Y. Hashimoto,
YIPQS Long-term workshop Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 20th September - 28th October, 2011.
16. Anharmonic oscillations in $^{44,52}\text{Ti}$ with Gogny-TDHFB (poster),
Y. Hashimoto,
YKIS2011 Symposium Frontier Issues in Physics of Exotic Nuclei (YKIS2011), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 11th - 15th October, 2011.
17. Nonlinear vibration and relaxation in Gogny-TDHFB calculation,
Y. Hashimoto,
Nuclear forces and neutron-rich matter, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 2012.3.1 — 2012.3.31.
18. Description of excited states in light nuclei with Skyrme interaction employing multiple Slater determinants
Yuta Fukuoka, Yasuro Funaki, Kazuhiro Yabana, Takashi Nakatsukasa
YIPQS Long-term workshop, Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 20th September - 28th October, 2011
19. Time-dependent Hartree-Fock Theory for Multi-nucleon transfer Reactions
K. Sekizawa and K. Yabana,
10th CNS International Summer School, 26th Sep. - 1st Oct., 2011.
20. Time-Dependent Hartree-Fock Theory for Multi-Nucleon Transfer Reactions
K. Sekizawa and K. Yabana,

YIPQS Long-term workshop Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011), 20th Sep. - 28th Oct., 2011

21. Three-Dimensional Calculation of Inhomogeneous Structure in Low-Density Nuclear Matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
XV.th Research workshop Nucleation Theory and Applications, Bogoliubov laboratory of Theoretical Physics, Dubna, Russia, Apr. 16-24, 2011.
22. Three-dimensional calculation of inhomogeneous nuclear matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
Future Prospects of Hadron Physics at J-PARC and Large Scale Computational Physics, J-PARC, Tokai, Ibaraki, Feb. 2-11, 2012.
23. Three-dimensional calculation of pasta structure in High and Low-density nuclear matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
The first International School for Strangeness Nuclear Physics, J-PARC and Tohoku Univ.

(B) 国内会議・研究会

1. 光捕獲熱核反応率の虚時間計算
矢花一浩
京都大学基礎物理学研究所研究会「微視的核反応理論による物理」、2011 年 8 月 1-3 日
2. 電子ダイナミクスの第一原理計算－光と物質の相互作用のミクロな記述－
矢花一浩
新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」「コンピューティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス」若手道場、大阪大学、2011 年 9 月 27 日
3. 物質中の光伝播を記述する Maxwell-TDDFT マルチスケール・シミュレータの開発
矢花一浩
筑波大学計算科学研究センター学際共同利用 H22 成果報告・H23 中間報告会、2011 年 9 月 13 日
4. パルス光の伝播を記述する Maxwell-TDDFT マルチスケール・シミュレータの開発
矢花一浩
新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス」研究会、東京大学、2011 年 10 月 7-8 日
5. A New Computational Approach for Radiative Capture Reaction Rate
矢花一浩
新学術科研費「素核宇融合による計算基礎科学物理学の進展研究会」、賢島、2011 年 12 月 3-5 日
6. 時間依存密度汎関数法によるパルス光伝播の第一原理計算
矢花一浩
東京大学物性研究所共同利用スーパーコンピュータ成果報告会「計算科学の課題と展望」東大物性研、2012 年 2 月 20-21 日
7. 高強度パルス光伝播の第一原理計算
矢花一浩、杉山健、篠原康、乙部智仁、G.F. Bertsch

第59回応用物理学関係連合講演会、早稲田大学、2012 年 3 月 15－18 日

8. 時間依存密度汎関数理論によるコヒーレントフォノンの記述
矢花一浩
日本物理学会第67回年次大会シンポジウム「凝縮系における超高速現象とコヒーレント物質制御への展
開：光化学反応から光誘起相転移まで」、関西学院大学、2012 年 3 月 24－27 日
9. 密度汎関数法を用いた原子核の大規模励起状態計算
寺崎 順
計算科学コロキウム、筑波大学計算科学研究センター、2011 年 5 月 24 日
10. QRPA calculation for use on passively paralleled computers
寺崎 順
第2回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム－PACS-CS による計算科学
の発
展と次世代コンピューティングへの展開－、筑波大学計算科学研究センター、2011 年 9 月 12、13
日
11. 原子核応答の大規模計算
寺崎 順
日本物理学会 2011 年秋季大会、弘前、招待講演
12. 戦略プログラム分野5、ユーザー支援
寺崎 順
日本物理学会 2011 年秋季大会核理論懇談会、弘前 (2011 年 9 月 16 日－19 日)
13. ユーザー支援報告
寺崎 順
戦略プログラム分野5主催の研究会「大規模計算による原子核研究の展開－核子多体系を中心に
－」
理化学研究所、和光、2011 年 1 月 25 日
14. Calculation of Transition Strength of Nuclei
寺崎 順
研究会「素核宇融合による計算基礎物理学の進展 - ミクロとマクロのかけ橋の構築 -」, 合歓の郷、
志摩、
2011 年 12 月 3 - 5 日
15. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei
寺崎 順
原子核理論研究室セミナー、筑波大学数理物質系、2012 年 1 月 20 日
16. Nuclear transition matrix elements of neutrino-less double-beta decay for determining the neutrino
mass
寺崎 順
計算科学研究センター年次報告会、筑波大学計算科学研究センター、2011 年 2 月 20 日
17. 原子核の密度汎関数理論の基底状態および二重ベータ崩壊行列要素への応用
寺崎 順
平成 24 年度 筑波大学計算科学研究センター学際共同利用ヒアリング、筑波大学計算科学研究セ
ンター、2012 年 3 月 2 日
- 18 ユーザー支援活動報告

寺崎 順

HPCI 戦略プログラム分野 5「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム、秋葉原コンベンションホール、東京、2012 年 3 月 7,8 日

19. Skyrme 力を用いた多スレーター行列式による軽い核の励起構造計算

福岡 佑太、船木 靖郎、矢花 一浩、中務 孝

大規模計算による原子核研究の展開－核子多体系を中心に－、理化学研究所 RIBF 棟2階大会議室、

2012 年 1 月 24 日-25 日

20. Skyrme 力を用いた多スレーター行列式による軽い核の励起構造計算

福岡 佑太、船木 靖郎、矢花 一浩、中務 孝

RCNP 研究会「クラスターガス状態探索のための研究戦略会議」、大阪大学核物理研究センター、2011 年 9 月 7 日-8 日

21. 多スレーター行列式の重ね合わせによる軽い核における励起状態の記述

福岡 佑太

2011 年度 原子核三者若手 夏の学校(白浜荘(滋賀県高島市) 8 月 16 日～8 月 21 日)

22. Description of Nucleon Transfer Reaction by TDHF Method

関澤一之、矢花一浩

基研研究会「微視的核反応理論による物理」、2011 年 8 月 1 日-3 日

23. TDHF 計算による核子移行反応の記述

関澤一之、矢花一浩

2011 年度原子核三者若手夏の学校、滋賀県高島市白浜荘、2011 年 8 月 16 日～ 21 日

24. 多核子移行反応断面積の TDHF 計算

関澤一之、矢花一浩

日本物理学会 第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス、2012 年 3 月 24 日～27 日

25. 3アルファ融合反応の新たな計算手法

赤堀孝彦、矢花一浩、船木靖郎

研究会「大規模計算による原子核研究の展開－核子多体系を中心に－」、理化学研究所 RIBF 棟二階大

会議室、2012 年 1 月 24、25

26. 低密度核物質の非一様構造による 3 次元結晶

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

2011 年度原子核三者若手夏の学校(白浜荘 (高島市、滋賀県)、2011 年 8 月 16 日～21 日)

27. 低密度核物質の非一様構造への系統的計算

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

日本物理学会秋季大会(弘前大学 (弘前市、青森県)、2011 年 9 月 16 日～19 日)

28. 構造を仮定しない計算による低密度核物質の非一様構造

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

素核宇宙融合による計算基礎物理学の進展研究会、合歓の郷 (三重県)、2011 年 12 月 3 日～5 日

29. 低密度原子核物質の非一様構造と中性子星のクラスター

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

日本物理学会第 67 回年次大会(関西学院大学 (西宮市、兵庫県)、2012 年 3 月 24 日～27 日)

30. クリロフ部分空間法を用いた TDDFT の線形応答計算
篠原康、二村保徳、矢花一浩、櫻井鉄也
日本物理学会 67 回年次大会（関西学院大学、2012 年 3 月 24 日-27 日）
31. 第一原理計算による半金属コヒーレントフォノン生成の記述
篠原康、矢花一浩、岩田潤一、乙部智仁、G. F. Bertsch
第 59 回応用物理学関係連合講演会、（早稲田大学、早稲田中・高等学校 2012 年 3 月 15 日-3 月 18 日）
32. 時間依存密度汎関数理論による半金属コヒーレントフォノン生成の記述
篠原康、矢花一浩、乙部智仁、岩田潤一、G.F. Bertsch
日本物理学会 2011 年秋季大会（富山大学 2011 年 9 月 21 日～24 日）
33. パルス光伝搬の Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション
杉山健、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、G.F. Bertsch
日本物理学会 2011 年秋季大会（富山大学 2011 年 9 月 21 日～24 日）

(C) ポスター発表

1. ARTED: Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulation code
矢花一浩、篠原康
第2回次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会、学士会館(東京)、2012 年 1 月 26 日
2. 高強度パルス光伝播を記述する Maxwell-TDDFT マルチスケール・シミュレーション
矢花一浩、杉山健、篠原康、乙部智仁、G.F. Bertsch
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発公開シンポジウム、ニチイ学館神戸ポートアイランドセンター、2012 年 3 月 5-6 日
3. Description of clustering states in light nuclei with Skyrme interaction superposing multiple Slater determinants (poster)
Yuta Fukuoka, Yasuro Funaki, Kazuhiro Yabana, Takashi Nakatsukasa
YKIS2011 Symposium, Frontier Issues in Physics of Exotic Nuclei (YKIS20
(Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 11th - 15th October, 2011))
4. Time-Dependent Hartree-Fock Theory for Multi-Nucleon Transfer Reaction
K. Sekizawa and K. Yabana
International Molecule "Nuclear forces and neutron-rich matter", 1st March - 31st March, 2012
5. Three-dimensional calculation of inhomogeneous nuclear matter
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆
The 11th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies
(理化学研究所 (和光市、埼玉県)、2011 年 11 月 14 日～17 日)
6. Real-Time TDDFT Simulation for Coherent Phonon Generation
Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otobe, George F. Bertsch
XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Kanazawa, Japan,
2011 Sep.
11-17
7. Coherent Phonon Generation in Real-Time TDDFT
Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otobe, George F. Bertsch
14th International Conference Density Functional Theory in Chemistry, Physics and Biology, Athens,

Greece, 2011 Aug. 29-Sep. 2

8. Maxwell+TDDFT Multi-Scale Simulator Describing Propagation of High Intensity Laser Pulse
T.Sugiyama, Y.Shinohara, T.Otobe, K. Yabana, G.F.Bertsch
14th International Density Functional Theory Conference (DFT2011)
Athens, Greece, August 29-September 2, 2011
9. Development of First-Principles Maxwell + TDDFT Multi-Scale Simulator for Propagation of High-Intensity Laser Pulse
T.Sugiyama, Y.Shinohara, T.Otobe, K. Yabana, G.F.Bertsch
The XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XVI)
(Ishikawa Prefecture Museum of Art, September 11-17, 2011)
10. Development of First-Principles Maxwell + TDDFT Multi-Scale Simulator for Propagation of High-Intensity Laser Pulse
T.Sugiyama, Y.Shinohara, T.Otobe, K. Yabana, G.F.Bertsch
The 14th Asian Workshop on First-Principles Electric Structure Calculations (The University of Tokyo, October 31-November 2, 2011)

(D) その他

1. 集中講義：フェルミ多粒子系ダイナミクスの計算科学
矢花一浩
京都大学理学研究科、2011 年 6 月 8－10 日
2. セミナー：時間依存密度汎関数理論－原子核物理からレーザー科学へ－
矢花一浩
京都大学物理第二教室談話会、2011 年 6 月 10 日
3. セミナー：First-Principles Description for Quantum Electron Dynamics Induced by Intense and Ultrashort Laser Pulses
K. Yabana
Seminar at Advanced Photonics Research Institute, Gwangyu, Korea, Feb. 23, 2012.

5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

5.1 センター内の連携活動

- ・システム工学研究科櫻井グループと、シフト法を用いた線形方程式解法の時間依存密度汎関数理論への応用に関して共同研究を行っている。(当グループに属する博士後期課程大学院生(D2)の篠原が、デュアルディグリー制度のもとで行っている共同研究。)
- ・センター内の宇宙分野・生命分野の教員と共同で、宇宙アミノ酸の起源に関するテーマで研究を行っている大学院生の指導に協力している。
- ・量子物性研究部門の研究者(トン准教授、前島助教他)と計算光科学を中心に定期的にセミナーを行っている。

- ・センターに新たに導入された GPU 並列計算機 HA-PACS の利用に向けて、光と物質の相互作用に関するマルチ GPU 計算コードの準備を進めている。

5.2 国内研究協力

- ・理化学研究所(中務准主任研究員)のグループ、新潟大学(松尾教授)のグループと、DFT に関する定期会合を開催し、一部の研究者と共同研究を進めている。
- ・分子科学研究所の信定准教授のグループと、戦略プログラム分野2での活動に基づく京コンピュータの利用を含め、電磁波と物質の時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算に関して共同研究を行っている。
- ・関西光科学研究所の理論研究者(乙部研究員)と、光と物質の相互作用に関する研究協力を行っている。

5.3 国際研究協力

- ・米国ワシントン大学の Bertsch 教授と、光と物質の相互作用に関する計算科学研究について、長年にわたる共同研究を継続している。
- ・韓国の GIST/APRI(高等光技術研究所)と、光科学に関する共同研究を立ち上げつつある。

5.4 社会貢献

- ・寺崎は、HPCI 戦略プログラム分野5のユーザー支援において、プログラム支援を取りまとめる役割を果たすとともに、2件のプログラム支援を行った。また、戦略プログラム分野5主催の原子核分野における大規模計算に関する研究会「大規模計算による原子核研究の展開—核子多体系を中心に—」を主催した(2012 年 1 月 24-25 日、於理化学研究所)。
- ・矢花は、HPCI 戦略プログラム分野5の活動で分野間連携を担当しており、戦略プログラム分野2と分野5の連携活動として量子系の大規模計算に関する連続研究会を組織した。
- ・本グループでは、実時間・実空間法に基づく時間依存コーン・シャム方程式の数値解法を主要な方法論として用いている。同様な方法は国内外で開発が進んでいるが、本グループで最近進展させた結晶中の電子ダイナミクスを記述する計算法に関してはまだ例が少なく、計算コードの公開に向けた準備を進めている。

III. 量子物性研究部門

III-1 量子状態制御グループ

1. メンバ

准教授 全 暁民
准教授 小泉 裕康
助教 前島 展也

教授 日野 健一（学内共同研究員、物質工学域）

2. 概要

レーザー照射による原子・分子状態の制御、固体における光誘起相転移、超伝導状態の制御から量子ビット操作につながる量子状態の制御等に関する研究を行っている。原子・分子系では、そのダイナミクス、およびそれらの電磁場との相互作用の理解と制御を、時間依存のシュレディンガー方程式を時間発展の直接解法で解く方法でシミュレーションを行っている。これは、強レーザー場における原子・分子の非線形過程や反陽子と原子の衝突などにおけるエキゾチック原子の生成、さらに振動磁場などの外場による物理的な過程の制御方法の探索につながる。また、パルスレーザー照射下における半導体(超格子)中の励起子、コヒーレントフォノン状態の解析、光誘起相転移を起こす系における CW レーザー誘起状態の解析も行なっている。さらに、巨視的な量子状態を室温で達成すべく、銅酸化物超伝導の機構解明も行っている。この研究は、スピン渦超伝導理論の構築に発展し、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした、量子コンピュータの開発に関する研究と広がっている。

3. 研究成果

[1] 水素原子による反陽子捕獲のヤコビ座標系を用いた精密計算 (全 暁民)

反水素原子生成の成功に続いて反水素原子捕獲の実験が報告され、反陽子関係の研究がますます活発になってきている。その中で水素原子による反陽子捕獲はもっとも基本的なクーロン三体系の問題でありながら、十分満足のできる精密計算がまだなされていない。陽子を頂点にとった V 座標系で量子力学的な計算が我々によってなされたが、ヤコビ座標系でないため大きなエラーがありうることが指摘された。

本研究、ヤコビ座標系を用いた精密な時間発展の計算方法を開発し、水素原子による反陽子捕獲詳細な断面積の再計算を行い、V 座標系による誤差[Mass Polarization (MP)]は図 1、2 のように、十分小さいことを確認した。

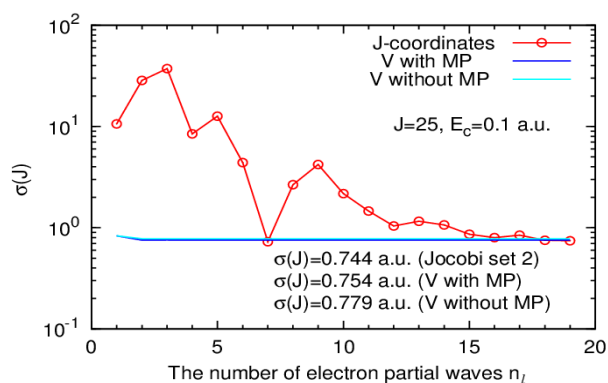


図 1 J=25 ヤコビ座標系による収束性を確認

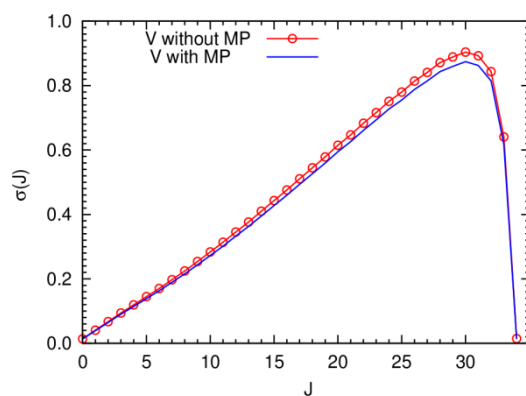


図 2. 全ての部分波に対して V 座標系による誤差

結論として、V 座標は反陽子捕獲の過程に対して十分正確であり、ヤコビ座標と比べて計算量が百分の一ほどで済む大変有効な表示であることが確認された。研究結果は Physical Review A に発表された。

[2] 強中赤外線レーザーにおける電離過程の解明 (全 暁民)

中赤外線における原子電離の実験で、強い低エネルギー電子が Nature の論文で報告された。

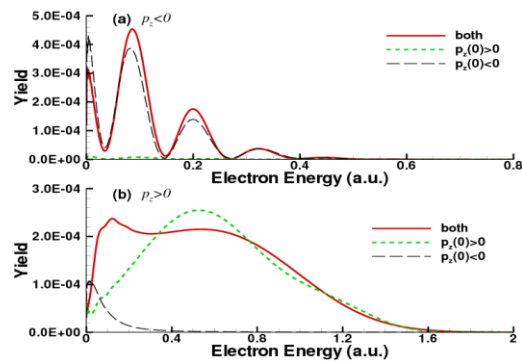


図 3. 電離電子のエネルギー分布

“Ionization Surprise”と呼ばれた現象であり、従来の実験では観測されなかった、また従来の良く使われた理論で解釈できなかった。その背景で、我々が開発した独自の計算手法で、図 3 のように、電離過程と電離された電子のレーザー中での発展に分けて、分析した。その結果、再散乱電子と直接電離した電子の干渉が強い低エネルギー電子の生成の原因であるということを解明した。この研究結果は Physical Review Letters に発表された。

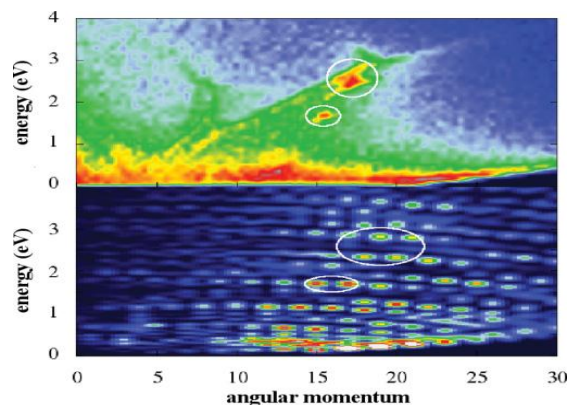


図 4. 量子と古典の計算を比べる

さらに詳しい情報を得るため、我々の量子計算と古典力学の計算を比べた。強い低エネルギー電子に対応する古典運動経路も、図 4 のように、特定の部分波を持つ電子が特定の運動エネルギーの場所に局在するというを確認して、それ以外の所には電離された電子量はかなり少ない。この現象のレーザー波長や強度との依存性もいろいろ調べた。この研究はウィーンの工科大学の理論グループと共同で行った。

結果は Physical Review A の Rapid Communications に登載された。

[3] 短パルスー強レーザーにおける電離電子運動量分布からのレーザー情報の解析（全曉民）

短パルスー強レーザーの情報、例えば強度、パルス幅、相対的な位相[Carry Envelop Phase CEP)]などを、実験的に直接得るのは極めて難しい。従来の測定方法は観測された右側と左側の出る高エネルギーと低エネルギー電子量と理論計算値を比べて、CEP を推定するものである。この方法は測定精度が良くないと指摘があった。最近観測技術の進歩に伴う、より精度が高い電子エネルギー分布の測定が可能になってきている。我々の独自の計算手法で高精度の

電子エネルギー分布（図 5）を提供でき、実験と比べると、より高精度なレーザー情報を得ることが可能になる。この研究結果は Physical Review A に掲載された。

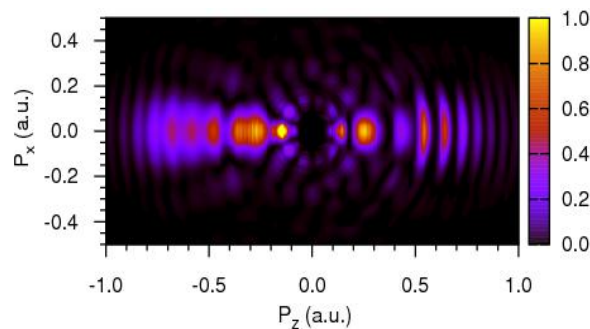


図 5. 電離された電子の運動量分布

[4] 赤外線による物質の透過率をアト秒範囲内で制御する方法の探索（全 暁民）

物質の透過率は光の物質の透過能力を表す重要な指標であり、物質の種類や物理状態によって決まるものである。いろいろな手法で透過率の制御が可能だが、短い時間内で、あるいは、フェト秒やアト秒で制御するのは難しい。我々の理論計算で、アト秒パルスレーザーと赤外線レーザーの到着時間の微小な差（フェト秒やアト秒）により、物質の透過率を制御することが可能になる。この制御方法はアメリカの共同研究者に提案して、実験により、図 6 のように実現された。この研究結果は Physical Review Letters に発表された。

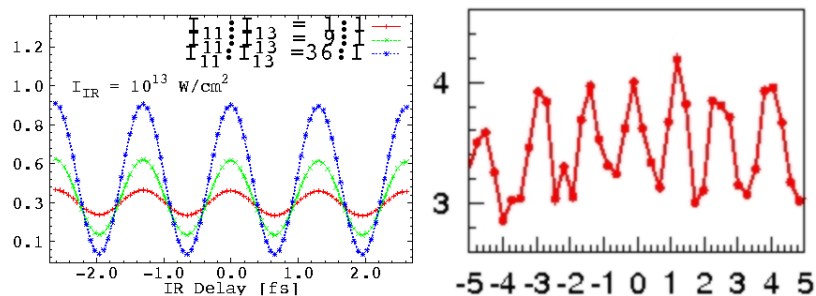


図 6. アト秒範囲内で光透過率の制御。（左）理論値、（右）観測結果。

[5] 光着衣励起子における動的Fano共鳴 (前島、日野)

物質中の電子状態に対する、強力な外場による非線形効果は量子ダイナミクスや状態のコヒーレント制御という観点から注目を集めてきた。例えば時間周期外場のもたらす非線形効果として動的局在(DL)が知られている。このDLがおこるような強い時間周期外場中の電子状態を記述する手法として、フロケ状態がある。我々は、このフロケ状態で記述される電子と正孔が束縛した光着衣励起子の形成により、半導体超格子の光学応答スペクトルがどのように影響を受けるかを調べた。得られた結果のうちで最も特筆すべき点は、DLが出現するレーザー強度領域を中心にしてファノ共鳴的な非対称ピークが光学応答スペクトルに現れることである。このファノ共鳴は強いレーザー外場によって生み出されるAC-ツェナー結合(ZC)によって、励起子状態と連続準位の間に相互作用が発生するためにおこる。またこの相互作用はレーザー外場によって制御可能なため、ファノ共鳴特有の物理パラメータもレーザーによって変化させられることが分かった。その意味で、このファノ共鳴は動的ファノ共鳴と呼ばれるものである。特にDLが起こるレーザー強度では、スペクトル形状の対称性が回復するとともに、スペクトル幅が最小になることが分かった。

また、上述の問題を数値的に解く高精度な方法としてR行列伝搬法を採用したが、この方法は計算量が極めて大きいため、並列化による計算の高速化がしばしば議論になっていた。よって我々は、R行列伝搬法を解くために有効な並列化法を提案した。鍵となるのは、セクター並列化である。R行列伝搬法においては動径方向の空間を多数のセクターに分割し、各セクター内で固有方程式を解くというプロセスが必要になる。我々の手法では、このセクターを各CPUコアごとに割り当てるという並列化法を採用した。一般の散乱問題に対するR行列伝搬法では、部分波毎の並列化に主眼が置かれているが、我々は光学応答のみに注目しているためs波しか解く必要がないという点でアルゴリズムが極めてシンプルになっている。我々は、並列化による高速化の効果についても検証を行い、CPUコア数に対して良い線形性をしめすこと、一方でコア間通信量の増大により並列化効率に頭打ちの傾向が出ることを確認した。

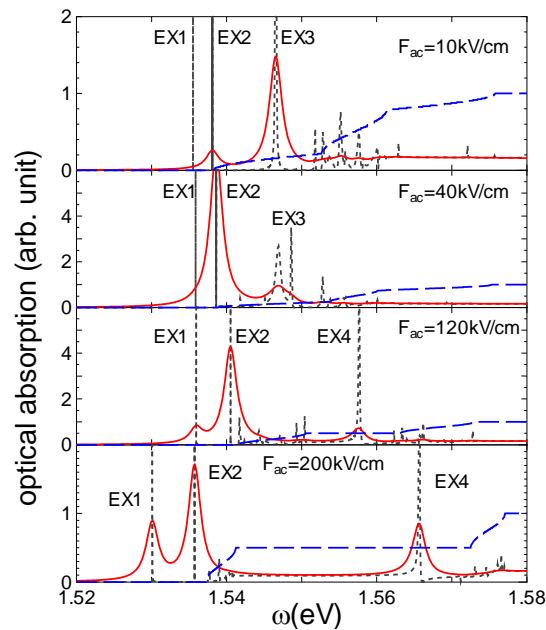


図 7. 光着衣励起子の吸収スペクトル。黒点線:自然スペクトル、赤実線:1meVの均一広がりをたたみ込んだスペクトル、青破線:状態密

[6] 擬1次元MX錯体における光誘起ダイナミクスの解析(前島、日野)

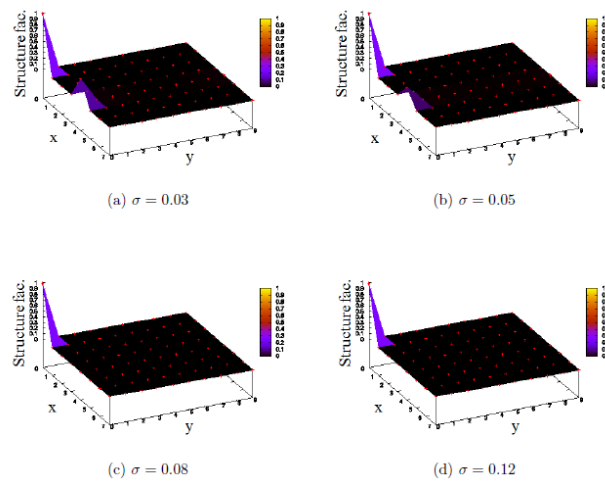


図 8. 光照射量(σ)を変えた場合の擬1次元MX錯体の構造因子。 σ の増大と共にCDW相に対応する $(\pi, 0)$ 成分が減少している。

遷移金属($M=\text{Ni, Pd, Pt}$) とハロゲン($X=\text{Cl, Br, I}$) が交互に結合した一次元ハロゲン架橋遷移金属錯体(MX 錯体) は安定状態としてMott 絶縁体およびCDW状態が観測される物質群の一つであり、Ni 錯体ではMott 状態、Pd およびPt 錯体ではCDW状態がそれぞれ安定となる

。加えて、MX 錯体では光照射により状態間の相転移が生じることが明らかにされており、CDWを基底状態にもつPd 錯体 $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$ においてはMott 絶縁体への光誘起相転移が報告されている。加えて、 $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$ は強い鎖間相互作用を持っていることが知られている。そこで本研究では、 $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$ での鎖間相互作用を含めた光誘起ダイナミクスの理論的解析を行った。その結果、まず、電荷分布などの物理量の解析から、光照射をきっかけとして鎖間相互作用を介した協力現象、すなわち光誘起相転移が起こっていることを理論的な裏付けを得た。そして光誘起相転移を起こす光照射率の閾値について、鎖間相互作用が小さい場合では、大きい場合に比べて最大で約三倍の光が必要になることがわかった。また、鎖間相互作用が無い系では協力現象が生じないことを確かめた。以上のことから、MX 錯体を考える上で、鎖間相互作用の持つ重要性を示すことができた。

[7]有機モット絶縁体R-TCNQ(R=K, Rb)におけるギャップ内状態の解析(前島、日野)

R-TCNQ(R=K, Rb)は擬一次元構造を持つ有機電荷移動錯体であり、強い電子相関のためにモット絶縁体となっている。またある有限の温度以下においてはスピンパイエルス不安定性による二量化相が実現している。この二量化相に光を照射して二量化を壊す実験的試みが以前より行われてきたが、特に最近の実験において、光照射直後に電荷移動ギャップ(～1eV)よりも低エネルギー側にギャップ内状態が出現することが見出され、その起源については未解決なままであった。

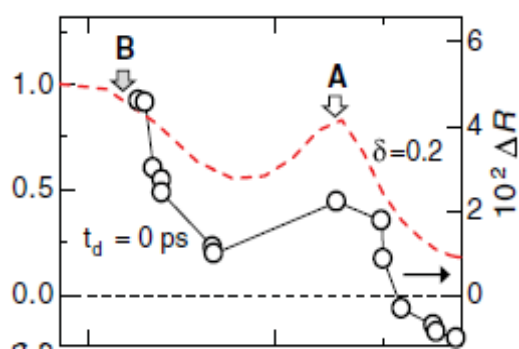


図 9. Rb-TCNQの光励起直後の光学応答スペクトル。黒実線が実験結果、赤破線がポーラロン状態を想定した場合の計算結果。

そこで我々は、R-TCNQのギャップ内状態の解析を学外実験グループと共同で行った。動的密度行列繰り込み群による計算と実験との比較の結果、電荷移動ギャップ以下の低エネルギー領域に図 9 のようなギャップ状態が出現することを確認し、実験と定量的にも一致す

ることを確かめた。更にこれらの状態の起源がポーラロン状態およびスピン励起状態であることを明らかにした。

[8] スピン渦超伝導理論の構築 (小泉)

銅酸化物超伝導の超伝導機構を説明する為に、スピン渦誘起ループ電流を電流の最小単位とする超伝導理論を構築した。この際、これまでの AC ジョセフソン効果の導出過程に不備があることを見いだした。我々が見出した不備は原理的なものであり、今後の超伝導現象の解析に対して慎重に対処していく必要があることを意味している。

[9] スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした、量子コンピュータの理論的研究 (小泉)
スピン渦が誘起するループ電流の右回り、左回りを量子ビットとする量子コンピュータを提案し、その実現のための理論的研究を行っている。

(特許申請) 量子コンピュータ, 発明者 (筑波大学、小泉裕康) 国際出願番号: PCT/JP2011/063881

(特許申請) 量子コンピュータ、発明者 (筑波大学、小泉裕康) 特願 2010-142978

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. "Mass polarization effect on the resonant energy of \bar{p} -He⁺ ions and the protonium formation in low-energy antiproton-hydrogen-atom collisions", X. M. Tong and N. Toshima, Physical Review A **85** (2012) 032709:1-5.
2. "Femtosecond and Attosecond Spectroscopy in the XUV regime", A. S. Sandhu and X. M. Tong, IEEE Journal of selected topics in quantum electronics **18** (2012) 351-363.
3. "Experimental Demonstration of the Breit Interaction which Dominates the Angular Distribution of X-ray Emission in Dielectronic Recombination", Z. Hu, X. Y. Han, Y. M. Li, D. Kato, X. M. Tong, N. Nakamura, Physical Review Letters **108** (2012) 073002:1-4.
4. "Low-energy peak structure in strong-field ionization by mid-infrared

- laser-pulses: two-dimensional focusing by the atomic potential", C. Lemell, K. I. Dimitriou, X. M. Tong, S. Nagele, D. V. Kartashov, J. Burgdorfer, and S. Grafe, *Physical Review A* **85** (2012) 011403(R):1-4.
5. "Attosecond streaking in the low-energy region as a probe of rescattering", X. H. Xu, L. Y. Peng, Z. Zhang, Q. H. Gong, X. M. Tong, E. A. Pronin, and A. F. Starace, *Physical Review Letters* **107** (2011) 183001:1-5.
6. "Laser information encoded in atomic asymmetrical ionization in few-cycle laser fields", T. Tabe, N. Ono, X. M. Tong, and N. Toshima, *Physical Review A* **84** (2011) 023409:1-6.
7. "Theory and experiment on laser enabled inner-valence Auger decay of rare gas atoms", X. M. Tong, P. Ranitovic, C. W. Hogle, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn, and N. Toshima, *Physical Review A* **84** (2011) 013405:1-8.
8. "Alignment dependent ionization of hydrogen molecules in intense laser fields", Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, *Physical Review A* **83** (2011) 063409:1-5.
9. "Controlling the xuv transparency of helium using two-pathway quantum interference", R. Ranitovic, X.M. Tong, C.W. Hogle, X. Zhou, Y. Liu, N. Toshima, M.M. Murnane, and H.C. Kapteyn, *Physical Review Letters* **106** (2011) 193008:1-4.
10. "Dimerization-induced spin-charge coupling in one-dimensional Mott insulators revealed by femtosecond reflection spectroscopy of Rb-tetracyanoquinodimethane salts", H. Uemura, N. Maeshima, K. Yonemitsu, and H. Okamoto, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 125112:1-7.
11. "Parallelization of the R-matrix propagation method for the study of intense-laser-driven semiconductor superlattices", Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, *Compt. Phys. Commun.* **183** (2012) 8-14.

12. "Photoexcitation-Energy-Dependent Transition Pathways from a Dimer Mott Insulator to a Metal", Kenji Yonemitsu, Satoshi Miyashita, and Maeshima Nobuya, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 084710:1-5.
13. "Interplay between Correlated Electrons and Quantum Phonons in Charge-Ordered and Mott-Insulating Organic Compounds, Kenji Yonemitsu, Nobuya Maeshima, and Yasuhiro Tanaka", Acta Phys. Pol. A 121 (2012) 372-374.
- 14 "Spin-vortices and Spin-vortex-induced Loop Currents in the Pseudogap Phase of Cuprates", R. Hidekata and H. Koizumi, J. Supercond. Nov. Magn. 24 (2011) 2253.
15. "Spin-vortex Superconductivity", H. Koizumi, J. Supercond. Nov. Magn. 24 (2011) 1997.
16. "Magnetic Excitation Spectra from Spin-Vortices and Spin-Vortex-Induced Loop Currents in Hole-Doped Cuprates", H. Koizumi and R. Hidekata, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) SB031

(2) 学会発表

(A) 国際会議

1. "Controlling the XUV transparency using two pathway quantum interference", P. Ranitovic, X. M Tong, C. W. Hogle, X. Zhou, N. Toshima, M. M. Murnane, and H C Kapteyn, XXVII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (Belfast, Northern Ireland, UK, 27 July - 2 August 2011)
2. "Alignment dependent ionization of hydrogen molecules in intense laser field", Y. J. Kin, X. M. Tong, and N. Toshima, XXVII International Conference on Photonic,

Electronic and Atomic Collisions (Belfast, Northern Ireland, UK, 27July - 2 August 2011)

3. ``Information encoded in Carry Envelope Phase Dependent Ionization'', T. Tabe, N. Ono, X. M. Tong and N. Toshima, The 12th International Conference on Multiphoton Processes & The 3rd International Conference on Attosecond Physics (Hokkaido University, Sapporo, Japan, July 3-8, 2011)

4. ``Probing Floquet State Dynamics of a Strong Field Dressed He Atom Using Attosecond Pulse Trains'', N. Shivaram, H. Timmers, X. M. Tong and A. Sandhu, The 12th International Conference on Multiphoton Processes & The 3rd International Conference on Attosecond Physics (Hokkaido University, Sapporo, Japan, July 3-8, 2011)

5. ``Infrared Laser Enabled Sub-shell Auger Decay of Ar Atoms'', X. M. Tong, P. Ranitovic, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn and N. Toshima, The 12th International Conference on Multiphoton Processes & The 3rd International Conference on Attosecond Physics (Hokkaido University, Sapporo, Japan, July 3-8, 2011)

6. ``Laser enabled Auger decay in argon atoms and dimers'', P. Ranitovic, X. M. Tong, C. W. Hogle, N. Toshima, M. M. Murnane, and H.C. Kapten, 42nd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics (Atlanta, Georgia, USA, June 13-17, 2011)

7. ``Laser-Induced Fano Resonance in Semiconductor Superlattice'', N. Maeshima and K. Hino, The 1st Annual World Congress of Nano-S&T (Oct. 23-26, 2011, Dalian, China)

8. ``Floquet Analysis of Dynamic Fractional Stark Ladders in Laser-Driven Biased Semiconductor Superlattices'', Tomohiro Karasawa, K. Hino, and N. Maeshima, The 1st Annual World Congress of Nano-S&T (Oct. 23-26, 2011, Dalian, China)

9. ``Laser-induced Fano Resonance in Semiconductor Quantum Well'', Y. Nemoto, K. Hino,

and N. Maeshima, The 1st Annual World Congress of Nano-S&T (Oct. 23-26, 2011, Dalian, China)

(B) 国内会議

1. ``水素原子による反陽子捕獲のヤコビ座標系を用いた精密計算”, 全 暁民、戸嶋 信幸 第 67 回日本物理学会、(2012 年 3 月 24 日、関西学院大学)
2. ``テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣励起子の光学応答スペクトル”, 前島展也、日野健一、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
3. ``擬一次元ハロゲン架橋金属錯体の光誘起ダイナミクスにおける鎖間相互作用の効果”, 齋藤陽平、前島展也、日野健一、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
4. ``半導体におけるコヒーレントフォノンの多チャンネル散乱理論による解析”, 柄澤朋宏、日野健一、前島展也、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
5. ``テラヘルツ波駆動ワニエ-シュタルク階段における光着衣電子の共鳴構造の解析”, 根本裕也、柄澤朋宏、日野健一、前島展也、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
6. ``半導体におけるコヒーレントフォノンの生成メカニズムの理論的解析”, 柄澤朋宏、日野健一、前島展也、日本物理学会、第 67 回年次大会、(2012 年 3 月 24 日-27 日、関西学院大学)
7. ``擬一次元ハロゲン架橋金属錯体の光誘起ダイナミクスにおける鎖間相互作用の効果 II”, 齋藤陽平、前島展也、日野健一、日本物理学会、第 67 回年次大会、(2012 年 3 月 24 日-27 日、関西学院大学)
8. ``スピン渦誘起ループ電流と仮想電場による巨大ネルンスト効果の説明’’, 小泉裕康、

日本物理学会第 66 回年次大会 (2012 年 3 月 24 日-27 日 関西学院大学)

9. ``銅酸化物高温超伝導体の $x=1/8$ における巨視的電流の抑制'', 秀方遼、小泉裕康、

日本物理学会第 66 回年次大会 (2012 年 3 月 24 日-27 日 関西学院大学)

10. ``スピン渦を含む 2 次元ハバード模型における電気伝導'', 秀方遼、小泉裕康、日本

物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)

11. ``スピン渦超伝導理論 I'', 小泉裕康、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)

III-2 計算物性グループ

1. メンバー

教授 白石 賢二

准教授 岡田 晋

助教 岩田 潤一

助教 神谷 克政

研究員 小鍋 哲

研究員 高木 祥光

研究員 Cristoph M. Puetter

2. 概要

計算物性グループは本年度は大きくわけて 2 つの大きなテーマを中心に研究を推進した。第 1 のテーマは新しい計算手法の開発、第 2 のテーマはナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンスの研究である。

3. 研究成果

【1】 グラフェンの層間相互作用による電子状態変調

グラファイトの電子状態は構成単位であるグラフェン間の相互作用により、わずかに変調されていることが知られている。すなわち、グラフェンの線形バンドがグラファイトにおいて通常の方物線のなバンド分散を有するようになる。ここでは SiO_2 上のグラフェンにおいては、局所的にバンド構造が変調され、結果として半金属のような振る舞いをすることを明らかにした。当該研究成果は国際電子デバイス会議で発表を行い世界的に注目を集め、3 件の新聞に取り上げられた。

【2】 次世代パワーデバイス材料 SiC の研究

SiC は次世代パワーデバイスとして期待されている。本研究では 10 年以上も謎として認識されていた SiC の MOSFET を Wet 酸化によって作製するときに生じる原因不明のしきい値シフト

の物理的起源を明快に明らかにした。SiC を熱酸化する際には酸化過程で C 原子が放出されると考えられる。こうして放出された C 原子は SiO₂ 中に取り込まれると、水素原子のアシストで炭酸イオンとして負に帯電することを明らかにした。水素原子は Wet 酸化において不可避に混入するものであり、Wet 酸化によるしきい値シフトは不可避であることを示している。

【4】 次世代メモリ抵抗変化型メモリの機能発現機構の電子レベルでの解明

次世代メモリとして期待される抵抗変化型メモリは酸素空孔の凝集・離散による伝導フィラメントの形成と破壊が機能発現機構と考えられている。しかしその電子レベルの理解は全く未踏の状態であった。本研究では伝導フィラメントの形成・破壊はキャリア注入をきっかけとする構造相転移であることを明らかにし、世界に先駆けて抵抗変化型メモリの電子レベルでの発現機構の提案を行うことに成功した。

【5】 星間空間によるアミノ酸の形成・破壊過程の研究

星間空間におけるアミノ酸の形成・破壊は太陽系における生命誕生につながる非常に重要な物性である。本研究では当該センターの宇宙グループ・原子核グループ・生命グループと共同して初期太陽系における L 型アミノ酸過剰発生の原因を第一原理量子論によって明らかにした。その結果、初期太陽系における真空紫外領域の円偏光照射が L 型アミノ酸過剰を引き起こすという説を提案するに至った。

【6】 大規模第一原理計算によるシリコンナノワイヤの電子構造解析

長年計算機工学グループと開発してきた RSDFT を「京」コンピュータ用にチューニングして、次世代デバイスとして注目されているシリコンナノワイヤ FET の電子状態解析を行なった。計算規模は数万原子となった。本研究は 2011 年のゴードンベル最高性能賞に輝いた。

<発表論文>

1. K. Shiraishi, K. Yamaguchi, K. Kamiya, A. Otake, and Y. Shigeta, “Guiding Principle of Highly Scalable MONOS-Type Memory”, ESC Transaction, 41-7, p71-p.78 (2011)
2. W. Feng, R. Hettiarachchi, Y. Lee, S. Sato, K. Kakushima, M. Sato, K. Fukuda, M. Niwa, K. Yamabe, K. Shiraishi, H. Iwai, and K. Ohmori, “Fundamental origin of excellent low-noise property in 3D Si-MOSFETs -Impact of charge-centroid in the channel due to quantum effect on 1/f noise-“, 2011 Technical Digest of 2011 International Electron Devices Meetings, 27.7-1-4, (2011)
3. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kamiya, Y. Shigeta, and K. Shiraishi, “First Principle Study of the Stability of H Atoms in SiN Layers on MONOS-Type Memories During Program/Erase Operations”, Proceeding of 2011 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, p.215-p.217 (2011).
4. K. Yamguchi, A. Otake, K. Kamiya, Y. Shigeta, and K. Shiraishi, "Atomistic Design of Guiding Principles for High Quality Metal–Oxide–Nitride–Oxide–Semiconductor

- Memories: First Principles Study of H and O Incorporation Effects for N Vacancies in SiN Charge Trap Layers", Jpn. J. Appl. Phys. 50, Art. No. 04DD05 (2011)
5. M. Muraguchi, Y. Sakurai, Y. Takada, Y. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, S. Nomura, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Collective Tunneling Model in Charge-Trap-Type Nonvolatile Memory Cell", Jpn. J. Appl. Phys. 50 Art. No. 04DD04 (2011).
 6. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe, M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, "Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Field", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BJ01 (2012)
 7. K. Kamiya, Y. Ebihara, M. Kasu, and K. Shiraishi, "Efficient Structure for Deep-Ultraviolet Light-Emitting Diodes with High Emission Efficiency: A First-Principles Study of AlN/GaN Superlattice", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BJ11 (2012).
 8. M. Arikawa, M. Muraguchi, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Role of Synthetic Ferrimagnets in Magnetic Tunnel Junctions from Wave Packet Dynamics", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BM03 (2012).
 9. Y. Ebihara, K. Kamiya, K. Shiraishi and A. A. Yamaguchi, "Intrinsic origin of the breakdown of quasi-cubic approximation in nitride semiconductors", physica status solidi (c), 8, 2279-2281, (2011)
 10. N. Umezawa and K. Shiraishi, "Theoretical model for artificial structure modulation of HfO₂/SiO_x/Si interface by deposition of a dopant material", Appl. Phys. Lett. 100, Art. No. 092904 (2012)
 11. K. Kamiya, M. Y. Yang, S.-G. Park, B. Magyari-Köpe, Y. Nishi, M. Niwa, and K. Shiraishi, "ON-OFF switching mechanism of resistive-random-access-memories based on the formation and disruption of oxygen vacancy conducting channels", Appl. Phys. Lett. 100, Art. No. 073502 (2012)
 12. K. Kamiya, Y. Ebihara, K. Shiraishi, and M. Kasu, "Structural design of AlN/GaN superlattices for deep-ultraviolet light-emitting diodes with high emission efficiency", Appl. Phys. Lett. 99, Art. No. 151108 (2011)

<学術講演>

1. 長川健太, 加藤重徳, 海老原康裕, 神谷克政, 白石賢二, 「4H-SiC 表面の初期酸化過程の第一原理計算による検討」、2011 年秋季 第 72 回応用物理学会学術講演会 2011 年 8 月 29~9 月 2 日 @山形大学
2. 海老原康裕、長川健太、加藤茂徳、吉崎智浩、神谷克政、白石賢二、「酸化時に形成され

- る負の固定電荷に関する理論的検討 -Intrinsic Origin of Negative Fixed Charge in Wet Oxidation for Silicon Carbide-」 SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 20 回講演会 2011 年 12 月 8～9 日 愛知県産業労働センター(ウインクあいち)
3. 長川健太、加藤重徳、海老原康裕、吉崎智浩、神谷克政、白石賢二、「4H-SiC 表面の初期酸化過程の第一原理計算による考察 -First Principles Analysis of Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surfaces-」 SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 20 回講演会 2011 年 12 月 8～9 日 愛知県産業労働センター(ウインクあいち)
 4. 加藤重徳、海老原康裕、吉崎智浩、長川健太、神谷克政、白石賢二、「4H-SiC 表面の NO 初期酸化過程の第一原理計算による検討 -First-Principles Analysis of NO Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surfaces-」 SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 20 回講演会 2011 年 12 月 8～9 日 愛知県産業労働センター(ウインクあいち)
 5. Y. Ebihara, K. Chokawa, S. Kato, K. Kamiya, and K. Shiraishi, "Theoretical Approach of Effects of Wet Oxidation to SiC Materials", International Symposium on Surface Science -Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation - (ISSS-6) 2011 年 12 月 11～15 日 Tokyo, Japan
 6. K.Chokawa, S. Kato, Y. Ebihara, T. Yoshizaki, K. Kamiya, and K. Shiraishi, "First Principle Analysis of the Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surface", International Symposium on Surface Science -Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation - (ISSS-6) 2012 年 12 月 11～15 日 Tokyo, Japan
 7. 海老原 康裕, 長川 健太, 加藤 重徳, 吉崎 智浩, 神谷 克政, 白石 賢二、「Intrinsic Origin of Negative Fixed Charge in Wet Oxidation for Silicon Carbide」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県三島市、東レ総合研修センター
 8. 長川 健太, 加藤 重徳, 海老原康裕, 吉崎 智浩, 神谷 克政, 白石 賢二、「First Principle Analysis of the Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surfaces」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県三島市、東レ総合研修センター
 9. 加藤 重徳, 海老原 康裕, 吉崎 智浩, 長川 健太, 神谷 克政, 白石 賢二、「第一原理計算による 4H-SiC 表面の初期酸化過程の考察」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県東レ総合研修センター
 10. 吉崎 智浩, 海老原 康裕, 長川 健太, 加藤 重徳, 神谷 克政, 白石 賢二、「熱酸化における 4H-SiC の欠陥の理論的検討」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県東レ総合研修センター
 11. 加藤重徳, 長川健太, 海老原康裕, 吉崎智浩, 白石賢二, 神谷克政、「4H-SiC 表面の NO 初期酸化過程の第一原理計算による検討」、2012 年春期 第 59 回 応用物理学関係連合後援会 2012 年 3 月 15～18 日、早稲田大学 早稲田キャンパス 早稲田中・高等学校興風館
 12. 長川健太, 加藤重徳, 海老原康裕, 吉崎智浩, 白石賢二, 神谷克政、「4H-SiC 初期酸化にお

- ける Dry 酸化と Wet 酸化の相違の理論的考察」、2012 年春期 第 59 回 応用物理学関係連合後援会 2012 年 3 月 15～18 日、早稲田大学 早稲田キャンパス 早稲田中・高等学校興風館
13. 佐藤皓允, 庄司 光男, 神谷 克政, 梅村 雅之, 矢花 一浩, 白石 賢二: “星間空間におけるアミノ酸キラリティ生成機構の理論的研究”, ALMA WorkShop 「宇宙と生命」, 国立天文台 三鷹キャンパス, 2012 年 1 月 21 日
 14. 佐藤皓允, 庄司 光男, 神谷 克政, 梅村 雅之, 矢花 一浩, 白石 賢二: “星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰の理論的研究”, 日本天文学会 2012 年春季年会, P224a, 龍谷大学 深草キャンパス, 2012 年 3 月 19 日～22 日
 15. <招待講演>K. Kamiya, M. Y. Yang, S.-G. Park, B. Magyari-Köpe, Y. Nishi, M. Niwa, and K. Shiraishi, “Universal Theory of ON-OFF Switching Mechanism of RRAM via VO Based Conducting Channels -Guiding Principle for Oxide Based High Quality RRAM-“, 1st International Workshop on RRAM, Leuven, Belgium, Oct. 20-21, (2011).
 16. Y. Ebihara, K. Chokawa, K. Kato, K. Kamiya, and K. Shiraishi, “Theoretical Approach of Effects of Wet Oxidation to Carbon Vacancy for 4H-SiC”, 42nd IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference, Arlington, VA, USA, Dec. 1-3, (2011).
 17. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai and K. Shiraishi, “Electron Dynamics in the Nano scale Transistor”, 2011 Asia_Pacific Workshop on Fundamentals and Applications of advanced. semiconductor devices, Daejeon, Korea, . June 29- July 1, (2011).
 18. M. Arikawa, Y. Hatsugai, K. Shiraishi and T. Endoh, “Electron dynamics in the ferromagnetic tunnel junction”, 2011 Asia_Pacific Workshop on Fundamentals and Applications of advanced. semiconductor devices, Daejeon, Korea, . June 29- July 1, (2011).
 19. <招待講演>K. Shiraishi, K. Yamaguchi, K. Kamiya, A. Otake, and Y. Shigeta, “Guiding Principle of Highly Scalable MONOS-Type Memory”, 220th Electrochemical Society Meeting, Boston, MA, USA, Oct. 9-14 (2011)
 20. W. Feng, R. Hettiarachchi, Y. Lee, S. Sato, K. Kakushima, M. Sato, K. Fukuda, M. Niwa, K. Yamabe, K. Shiraishi, H. Iwai, and K. Ohmori, “Fundamental origin of excellent low-noise property in 3D Si-MOSFETs -Impact of charge-centroid in the channel due to quantum effect on 1/f noise-“, International Electron Devices Meetings, Dec.5-7, Washington D.C. USA, (2011)
 21. <招待講演> Kenji Shiraishi, “Computational Sciences toward Developing Semiconductor Industry”, 第 21 回日本 MRS 学術シンポジウム、(2011 年 12 月 19 日～21 日、横浜)
 22. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kamiya, Y. Shigeta, and K. Shiraishi, “First Principle Study of the Stability of H Atoms in SiN Layers on MONOS-Type Memories During Program/Erase Operations”, 2011 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, Sept. 8-10, Osaka, Japan (2011).
 23. M. Arikawa, M. Muraguchi, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Role of Synthetic Ferrimagnets

- in MTJs from Wave Packet Dynamics", 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011) September 28-30, Aichi, Japan, 2011
24. K. Kamiya, M. Kasu, and K. Shiraishi, "First-Principles Study of Electronic Structures of AlN/GaN Superlattices," 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011) September 28-30, Aichi, Japan, 2011
25. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe, M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, "Multi Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Fields", 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011) September 28-30, 2011
26. <招待講演>白石賢二、「次世代 LSI 開発における計算科学の位置づけと利用方法」、日本物理学会 2011 年秋季大会シンポジウム「ナノスケール量子輸送の計算科学的研究の現状・展望と次世代スパコンへの期待」、(2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
27. <IEEE Distinguished Lecture> K. Shiraishi, "Computational Science Studies toward Future Nano-Devices", WIMNACT Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology 31, Jan. 30th, Tokyo Institute of Technology, Yokohama, Japan, (2012)
28. <IEEE Distinguished Lecture> K. Shiraishi, "Interface Physics and Its Approach to Modern Devices -A Computational Physics Approach-", Nov. 27, Tohoku University, Sendai, Japan (2012).

IV. 生命科学研究部門

IV-1 生命機能情報分野

1. メンバ

助教 庄司 光男

2. 概要

生命機能情報分野では生体内で重要な働きをしている蛋白質、核酸等に注目し、その特異的機能を理論的に解明することを目的としている。今年度は、一酸化窒素還元酵素と DNA トポイソメラーゼに注目し、高精度計算手法(QM/MM)を用いてこれらの特異的かつ効率的な化学反応を初めて明らかにした。また、L型アミノ酸生成過剰や異常型プリオン蛋白質の立体構造予測研究においても幾つか重要な結果を得た。これらの理論解明には膨大な計算が必要であり、これまで用いていた並列性能の低い計算プログラムでは取り扱う事が困難であった。そこで、高並列環境に適した計算プログラムを整備し、スーパーコンピュータ(T2K-Tsukuba 等)を活用することで結果を出した。さらなる計算速度の向上には、計算プログラム(分子動力学法、第一原理計算法)の GPU 対応が必須となる。そのため、HPC 分野と連携し、プロファイリングを行い、プログラム開発のための調査を行った。

3. 研究成果

【1】 一酸化窒素還元酵素(NOR)の反応機構の理論的研究

一酸化窒素還元酵素(NOR)は一酸化窒素(NO)を亜酸化窒素(N₂O)に変換する反応 ($2\text{NO} + 2\text{e}^- + 2\text{H}^+ \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$) を触媒し、微生物の嫌気呼吸経路を担っている。生成物の N₂O は大気中に拡散することで、強力な地球温暖化ガス (CO₂ の 300 倍) として働くため、NOR は多くの分野で注目されている。NOR は膜蛋白質であり結晶化が困難で、立体構造が不明であった。2010 年に初めて X 線結晶構造解析が成功し、鉄 2 核(Fe_B, Fe_{b3})で構成される活性中心構造を持つことが判明した(Fig.1)。しかしながら求められた構造は休止状態(酸化状態)にあり、活性中心には基質 NO が入る空間は無く、反応機構は推定できなかった。そこで我々は X 線構造を基に NOR の反応機構についての理論的解明を行った。QM/MM 法を適用し、反応中心は高精度第一原理計算法(Broken-symmetry DFT: QM)を、周りの蛋白質は分子動力学法(MM)で取り扱った。NO から N₂O が生成するまでの各反応ステップについて順に中間状態と遷移状態探索を行った。

(1) 休止状態(NO が結合していない状態)

(2) 基質結合状態(NO が 1 分子結合した状態) Fe_B, Fe_{b3} の 2 つのサイトに NO は N と O それぞれで配位が可能であるため、合計 4 状態を求めた。N 配位のほうが O 配位よりも安定であり、Fe_B よりも Fe_{b3} に配位した方が安定であることが分かった。

(3) 基質結合状態 (NO が 2 分子結合した状態)

NO 2 分子が結合した状態は 3 つの結合様式が考えられるが、**cis-Fe_{b3}** 形式が最も安定であった。また、初めの NO が部分的に還元されていることで、2 つめの NO は低い反応障壁で N-N 結合形成が行えることが分かった。

(4) NO 結合乖離過程

最も高いエネルギー障壁を持つ段階である。鉄中心は **Fe_B(IV)=O**, **Fe_{b3}(II)** のフェリル中間体となり、**Glu211** が **Fe_B** に二座配位することで **hyponitrite** 中間体の過剰な安定化を防いでいることが分かった。この **Glu211** は保存アミノ酸であり、反応機構にとって極めて重要な役目を持っていることが分かった。

(5) N₂O 脱離過程

N₂O は脱離 **Fe_{b3}** のスピン状態が **low-spin** から **high-spin** 状態へ変化する過程で N₂O が乖離させている事が分かった。

これらの反応では電子状態が反応途中で変化しており、正確な電子状態を求めることが、正確な反応機構解明に必須である。また、各中間状態や遷移状態探索は多くの計算が必要となるため、**T2K-Tsukuba** や **HECToR** 等のスーパーコンピューター利用が欠かせなかった。**NOR** における N₂O 生成メカニズムの解明は(1)環境学的重要性、(2)生物学的重要性、(3)化学的重要性、(4)医療への応用 に対して極めて重要である。そのため、大きなインパクトと波及効果を与える事が期待できる。現在論文にまとめ、投稿準備中である。

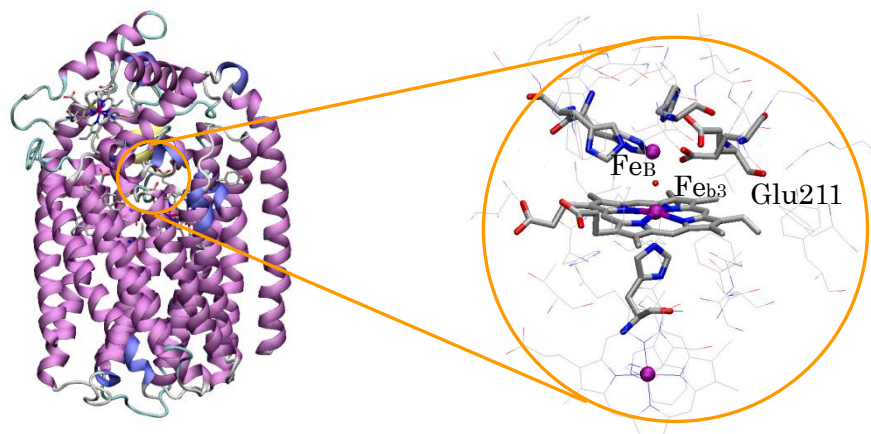


Fig. 1. NOR の全体構造と活性中心構造

【2】DNA トポイソメラーゼ II における DNA 再結合反応の理論的解明

DNA は細胞核内で高度に折りたたまれて収納されている。そのため、DNA の転写や複製の際には、DNA 鎖のねじれ(トポロジ)が問題となるが、これは DNA トポイソメラーゼによって解消されている。DNA トポイソメラーゼは生命にとって不可欠な酵素であるだけでなく、抗生物質や抗がん剤に対する有力な標的であり、現在盛んに創薬研究がなされている。トポイソメラーゼの触媒サイクルは DNA の切断と再結合の二つがあるが、分子レベルでの触媒機構については未だ解明されていない。本研究では反

応障害に最も重要とされている再結合過程に注目し、DNA トポイソメラーゼ II(DNA-topo II)の DNA 再結合反応を QM/MM 法によって理論的に解明した(Fig.2)。

我々は (1)金属イオンの役割、(2)水と保存アミノ酸残基を介した求核剤活性化のメカニズムを明らかにした。これらは DNA-topo II における保存アミノ酸残基の役目を説明する初めての知見である。これらの結果は、今後新たな阻害剤を開発していくための、非常に有益な指針となりうる。本研究は花岡恭平君が主に研究を進めた。現在論文にまとめ、投稿準備中である。

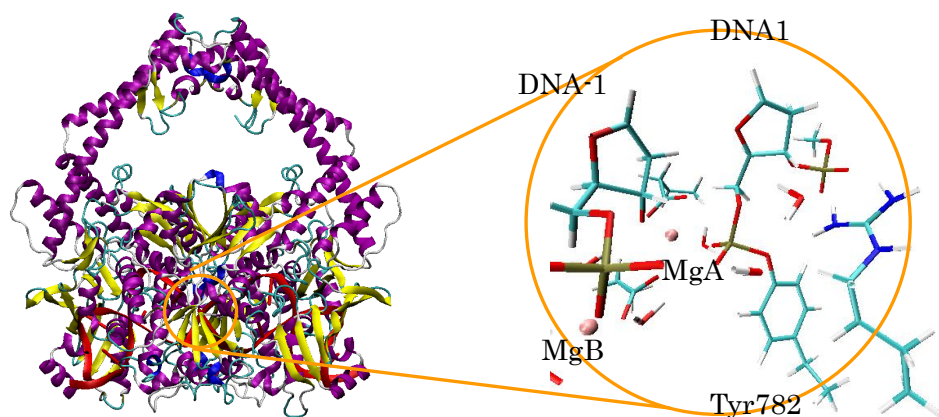


Fig. 2. DNA-topoII の全体構造と活性中心構造

【3】 原始太陽系におけるL型アミノ酸過剰についての理論的研究

地球上の生命を構成しているアミノ酸は、鏡像異性体であり、L 型と D 型という鏡合わせにした二つの立体構造を持つ。実験室中における化学合成では、L 型と D 型はそれぞれ等量生成されるにも拘らず、生命はほぼ 100%が L 型により形成されている。この矛盾を説明する仮説として、アミノ酸の起源が地球外から来たという説がある。このシナリオでは、宇宙空間中で円偏光が生成し、L 型と D 型のうち一方のアミノ酸：例えばD型アミノ酸が選択的に破壊され、L 型アミノ酸の存在比が多くなり、現在の L 型アミノ酸世界が形成されたという説である(Fig.3)。我々は、この説を理論的に検証するため、(1)どのような円偏光によってアミノ酸が崩壊するのか (2) どのような崩壊経路が存在するのか、について研究を行った。その結果、紫外領域において強い吸収を持つこと、CA-AB 結合を切る経路が存在すること、隕石中に存在が確認されているアラニン、バリンに共通した性質であることが分かった。本研究は佐藤皓允くんが主に研究を進め、梅村雅之先生、矢花一浩先生、白石賢二先生、神谷克政先生、庄司の協同研究体制でなされた。

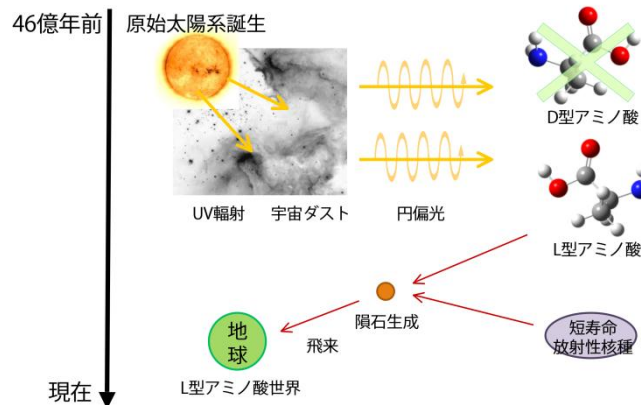


Fig.3 L型アミノ酸生成シナリオ

【4】異常型プリオン蛋白質の立体構造予測

プリオンとは哺乳類で発見されたタンパク質性の感染因子のことである。正常な立体構造とは異なる立体構造のタンパク質(プリオン)が、正常型タンパク質を次々と異常型に転換、凝集していくことで、アミロイド線維と呼ばれる線維構造を形成する(Fig.4)。この線維が生体内に蓄積すると細胞死を引き起こし、様々な神経性疾患の引き金となる。日本では 2001 年に牛での狂牛病感染が確認され、人にも伝染する可能性が指摘されたため、社会的にも大きな衝撃をもたらした。しかしながら、感染機構や異常型タンパク質の立体構造など、分子レベルでは明らかにできていないため、生物、化学、物理から医学にまたがる大きなフロンティア領域として科学的解明が期待されている。本研究では生物学的研究が最も進んでいる酵母プリオン Sup35 に注目し、この未知の立体構造を計算機シミュレーションによって再現することで、立体構造変化や感染機構を理論的に明らかにする事を試みた。その第一歩として、実験的に提唱されているモデルの1つである β ヘリックスモデルの熱力学的安定性の検討を行った。室温で $1 \mu s$ の分子動力学シミュレーションを行った。特徴的な β シート構造が所々で壊れ、 β シートとループ構造の繰り返しパターンが現れた。この部位がヘリックス構造を安定に保つために必須であると考えられる。 β シートとループ構造の繰り返しパターンは、HET-s と呼ばれる他のプリオンでもみられている。HET-s でみられるモチーフと本研究で得られたパターンは非常に類似性が高いことが分かった。本研究は近藤大生君が主に研究を進め、東工大の田口英樹先生、野間繁子先生、神谷克政先生、庄司の協同研究体制でなされた。

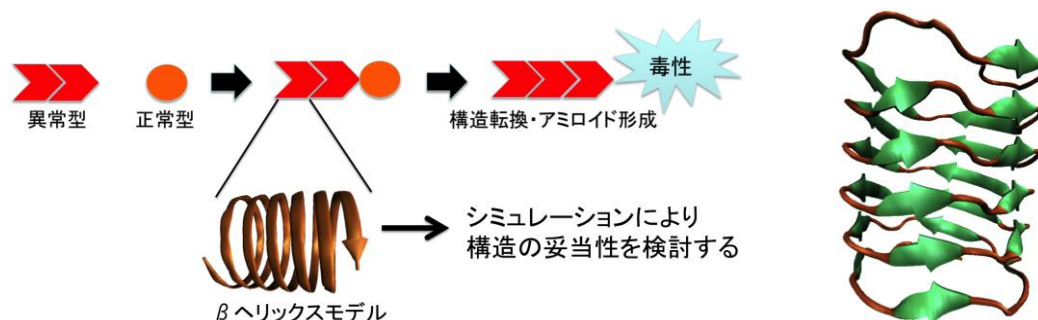


Fig. 4 プリオン蛋白質のアミロイド形成と $1\mu s$ の MD シミュレーション結果

【5】スーパーコンピュータ利用について

我々はこれまで QM/MM 計算に 2006 年版 GAMESS を基に開発したプログラムを用いていたが、(1) DFT 計算が遅い、(2)対応する汎関数が限られている、(3)並列化効率が悪い(<64 core)という問題があった。そこで、高並列化への大幅な改良を行うことを考えたが、調査の結果、NWChem プログラムパッケージを用いることで効率よく大規模並列環境(スーパーコンピュータ)に対応できる事が分かった。研究に必要なユーティリティプログラムを作成し、研究環境を整備した。T2K-Tsukuba において 512core でも効率よく動作する事を確認した(Fig.5)。また、一万軌道の SCF 計算も行えるため、60残基の蛋白質ならまるごと第一原理計算できる事がベンチマーク測定により判明した。昨年度末東日本大震災により T2K-Tsukuba が停止し、研究が中断されたが、エジンバラ大学 EPCC により、HECToR を利用させて頂くことができた。我々は NOR と DNA-TopoII の理論解析に大いに活用させて頂き、研究を行う事ができた。ここに心から感謝の意を表します。

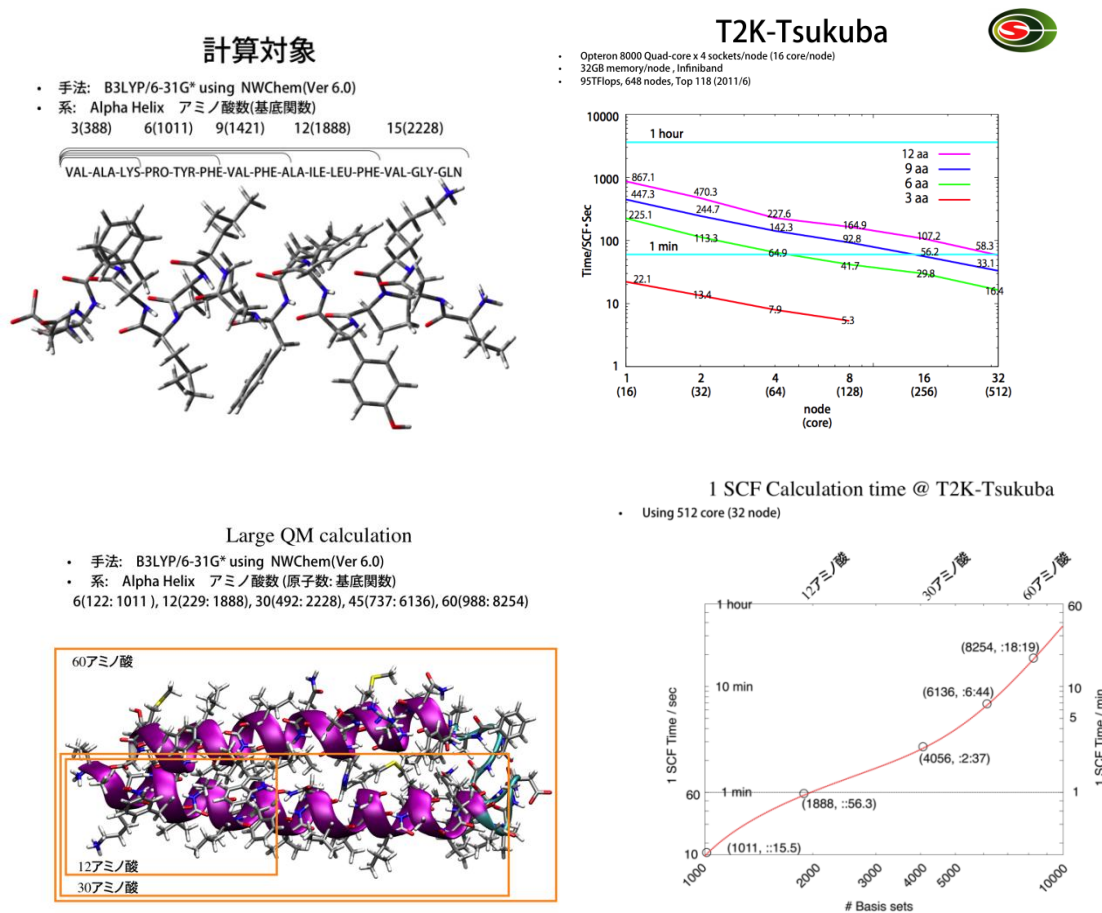


Fig5. T2K-Tsukuba における DFT ベンチマーク計算

【6】 GPGPU による計算加速

生命科学研究分野では、より短期間での問題解明やよりリアリスティックなシミュレーションのために、計算のさらなる高速化と大規模化対応が欠かせない。一方、近年の計算機環境は目覚ましく発展している。CPU 単体の演算性能向上は見込めない段階に達し、現在は超並列やヘテロ並列計算によって計算の高速化を行う段階に入っている。中でも、GPU を用いるヘテロ計算機は消費電力や計算機コストの点でメリットが非常に大きい。そのため我々は QM/MM 計算を GPU 環境で行う事で、新たな生命科学研究領域を開拓することを試みている。

QM/MM 計算においてボトルネックは QM(量子力学) 計算である。QM 計算のプロファイリングを詳細に行い、二電子積分ルーチンが最も重いことが分かった。しかしながらパッケージに組み込まれている CPU 二電子積分コードは非常に煩雑であり、GPU 対応させることは非常に難しい。そこで、改良が行いやすいシンプルな二電子積分ルーチンを GPU 対応させることを試みている。本研究は藤田典久さんが主に研究を進め、朴泰介先生、塙敏博先生、梅田宏明先生、庄司の協同研究体制でなされた。

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. M. Shoji, K. Hanaoka, A. Sato, D. Kondo, M. Yang, K. Kamiya, K. Shiraishi, Calculation of the Electron Transfer Coupling Matrix Element in Diabatic Reactions, *Int. J. Quantum Chem.*, accepted(2012). DOI: 10.1002/qua.24074
2. K. Yamaguchi, H. Isobe, S. Yamanaka, T. Saito, K. Kanda, M. Shoji, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya and M. Okumura, Full geometry optimizations of the mixed-valence $\text{CaMn}_4\text{O}_4\text{X}(\text{H}_2\text{O})_4$ ($\text{X}=\text{OH}$ or O) cluster in OEC of PS II: Degree of symmetry breaking of the labile Mn-X-Mn bond revealed by several hybrid DFT calculations, *Int. J. Quantum Chem.*, 13 APR 2012, DOI: 10.1002/qua.24117
3. T. Saito, M. Shoji, K. Kanda, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Kitagawa, S. Yamada, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theory of chemical bonds in metalloenzymes. XVII. Symmetry breaking in manganese cluster structures and chameleonic mechanisms for the O-O bond formation of water splitting reaction, *Int. J. Quantum Chem.*, 112, 121-135 (2012).
4. T. Saito, S. Yamanaka, K. Kanda, H. Isobe, Y. Takano, Y. Shigeta, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, M. Okumura, M. Shoji, Y. Yoshioka and K. Yamaguchi, Possible mechanisms of water splitting reaction based on proton and electron release pathways revealed for CaMn_4O_5 cluster of PSII refined to 1.9 Å X-ray resolution, *Int. J. Quantum Chem.*, 112, 253-276 (2012).

(2) 学会発表

<口頭発表>

1. 佐藤皓允、庄司光男、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、星間空間における L 型アミノ酸過剰の理論的研究, 天文学会春季年会、2012/03/22.
2. Mitsuo Shoji, Computational Bioscience Utilizing Supercomputers: Performance and Applications, LBNL and CCS-Tsukuba Joint Workshop, CCS, University of Tsukuba, 2012/3/19.
3. Mitsuo Shoji, QM/MM Studies on the reaction mechanisms in metalloenzymes, Exascale Symposium, The University of Edinburgh, 2012/2/23.
4. 佐藤 皓允、庄司光男、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、星間空間におけるアミノ酸キラリティ生成機構の理論的研究, ALMA ワークショップ, 2012/01/21.
5. K. Hanaoka, D. Kondo, M. Yang, K. Kamiya, M. Shoji, K. Shiraishi, Theoretical investigation for mechanism of DNA religation by E.coli topoisomerase IA, 第 84 回日

本生化学会大会、国立京都国際会館, 2011/09/23.

6. D. Kondo, K. Hanaoka, M. Yang, K. Kamiya, M. Shoji, S. Kawai-Noma, H. Taguchi, K. Shiraishi, Theoretical Investigation of Structural Stability of beta;-Helix Model for Amyloid Fibrils from Yeast Prion Sup35, The 49th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Hyogo, 2011/09/06.
7. M. Shoji, D. Kondo, K. Hanaoka, M. Yang, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, Theoretical investigation on the substrate binding states of nitric oxide reductase, The 49th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Hyogo, 2011/9/18.

<ポスター発表>

1. K. Hanaoka, D. Kondo, M. Yang, K. Kamiya, M. Shoji, K. Shiraishi, Theoretical investigation for mechanism of DNA religation by E.coli topoisomerase IA, 第 84 回日本生化学会大会、国立京都国際会館, 2011/09/23.
2. 庄司光男、近藤大生、花岡恭平、梁 文榮、梅田宏明、神谷克政、白石賢二, 一酸化窒素還元酵素における基質結合状態についての理論的研究, 第 84 回日本生化学会大会、国立京都国際会館, 2011/09/23.
3. K. Hanaoka, D. Kondo, M. Yang, K. Kamiya, M. Shoji, K. Shiraishi, Computational analysis for DNA religating reaction by E.coli topoisomerase IA, ISTCP-VII, Waseda, 2011/08/23.
4. M. Shoji, K. Hanaoka, M. Yang, D. Kondo, K. Kamiya, K. Shiraishi, A new procedure for the calculation of electron transfer coupling matrix element, ISTCP-VII, Waseda, 2011/08/23.

4. 連携・国際活動・社会貢献、その他

1. 庄司光男、花岡恭平、佐藤皓允、第 1 回つくば科学研究コンテスト、筑波大学大学会館、2012/3/17.
2. 庄司光男、Poster 展示、SC11, 2011/11/15.
3. 花岡恭平、Gromacs での分子動力学法 (MD) の入門 (基礎編)、公開講習会 (生命科学WG), CCS, 2011/10/27.
4. 庄司光男、生命科学研究分野研究紹介, 物理チャレンジ (宮城県聖ウルスラ学院英智高等学校), CCS 2011/9/1
5. 佐藤皓允、花岡恭平、庄司光男、大学説明会 (物理学類), 2011/8/27.
6. 朴泰祐, 佐藤三久, 塙敏博, 児玉祐悦, 高橋大介, 建部修見, 多田野寛人, 藏増嘉伸, 吉川

耕司, 庄司光男, 「演算加速装置に基づく超並列クラスター HA-PACS による大規模計算科学」, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(21), pp. 1-7, 2011 年 7 月.

IV-2. 分子進化的分野

1. メンバー

准教授 稲垣祐司 (生命環境系)
教授 橋本哲男 (共同研究員・生命環境系)
特任助教 田邊晶史 (生命環境科学研究科)
学振特別研究員 PD 神川龍馬 (生命環境科学研究科)

2. 概要

分子進化的分野では、真核生物の主要グループ間の系統関係解明に向け、主に 3 つの「柱」を設定し研究を進めている。

1. 新奇真核生物の発見 真核生物の多様性の大部分は肉眼で認識することが難しい単細胞生物であるため、これまでの研究では真核生物多様性の全体像を十分に把握しているとは言いきれない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核生物を単離・培養・培養株化することを目指している。
2. 大規模配列データ解析 真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養と遺伝子データの取得をおこなっている。そのデータを基に、大規模配列データ解析を行い正確な真核生物系統の推測を目指している。
3. 分子系統解析の方法論研究 分子系統解析においては、解析する配列データの特長、使用する解析法・配列進化モデルなどにより、系統推定に偏りが生じることが知られている。これまでの方法論は、単一遺伝子データに基づいて研究されてきたが、複数遺伝子から構成される大規模配列データを解析するための方法論の検討はそれほど進んでいない。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、方法論的研究を行っている。

3. 研究成果

【1】大規模配列データ解析 (神川、稲垣、橋本)

(1) クリプト藻類に近縁な真核微生物種の解析

パラオ共和国の海水サンプルから単離した新奇従属栄養性真核微生物 *Palpitomonas bilix* の網羅的発現遺伝子 (expressed sequence tag/EST) データを約 100 万リード・合計配列長 320 万塩基対を取得した。H22 年度に行った 159 遺伝子配列にもとづく分子系統解析では *P. bilix* はクリプト藻類との近縁性を示した。また *Palpitomonas* とは別の従属栄養性真核微生物であるカタブレファリス類もクリプト藻類に近縁であることが明確となったため、*Palpitomonas* の系統的位置を正しく推測するためにはカタブレファリス類を解析に含める必要が生じた。そこで H23 年度にはカタブレファリス類の一種である *Roombia* sp. の大規模 EST 解析を行った。イルミナシーケンシングを用いたこの EST 解析により約 2 億塩基対の配列データを取得し、

Palpitomonas・*Roombia* の両配列を含むデータセットの作成を開始した。H24 年度には大規模系統解析により、カタブレファリス類を含め *Palpitomonas* の系統的位置に関する最終的解析を行い、その結果を投稿論文に纏めることを開始する。

Palpitomonas・*Roombia* 等クリプト藻類に近縁な従属栄養性真核微生物に関する研究は、科学研究費補助金基盤研究 (B)「ハプト・クリプト藻類を含む新奇巨大生物群の提唱とクロムアルベオラータ仮説の検証」(代表・稲垣；課題番号 21370031) の支援をうけた。

(2) 新奇真核生物種 *Tsukubamonas globosa* の解析

筑波大学構内の兵太郎池から単離された新奇従属栄養性真核微生物 *Tsukubamonas globosa* は、エクスカバータ生物群の Discoba と呼ばれるグループに含まれる。我々は、H23 年度までにカナダ・Dalhousie 大学の Andrew Roger 博士との共同研究として *Tsukubamonas* の EST 解析を行った。H23 年度には EST データを元に 159 遺伝子データを作成し大規模系統解析を行った。Discoba クレードはヤコバ類と盤状クリステ類 (ディスクリステータ) の 2 つのサブクレードに分けることが、159 遺伝子解析では *Tsukubamonas* はそのどちらのグループにも含まれないことが分かった。従って Discoba クレード中での *Tsukubamonas* の位置は、①ヤコバ類の根元から分岐する、②盤状クリステ類の根元から分岐する、③Discoba クレードのもっとも祖先的な位置から分岐する、のいずれかであるはずである。しかし上記 3 つの分岐位置のうちどれが尤もらしいかは、159 遺伝子解析では明確にならなかった。単一遺伝子データを個別にチェックしたところ、多数のデータに遺伝子の水平移動、他生物の遺伝子配列の混入が見られた。H24 年度には、*Tsukubamonas* の系統的位置を確定するため使用する単一遺伝子データから系統解析の「ノイズ」をもたらす配列を削除し、再度 159 遺伝子データを解析する。

Discoba 生物群のサブグループ・ヤコバ類のミトコンドリア (mt) ゲノムは、一般の真核生物 mt にくらべより多くの遺伝子をコードしている。従って Discoba 生物群の mt ゲノムはもっとも原始的であるとも考えられ、mt ゲノムと真核生物の初期進化を考察する上で極めて重要である。H22 年度から、Discoba 生物群のメンバーである *Tsukubamonas* の mt ゲノムの完全解読を目指し実験を進め、部分ゲノム配列 (合計 4 万塩基対) を決定した。H23 年度はさらにゲノム解析を続け、mt ゲノムの完全解読に成功した。*Tsukubamonas* は 5 万 3 キロ塩基対の環状 mt ゲノムをもち、ユニークな遺伝子構成をしていた。例えばこれまでヤコバ類を含むごく一部の mt しかコードしていない翻訳伸長因子 Tu (*tufA*) や ATP 合成酵素サブユニット 3 (*atp3*) が *Tsukubamonas* mt ゲノムにコードされていた。またこれまで他の mt ゲノム上には確認されていないリボソームタンパク 36 (*rps36*) が *Tsukubamonas* mt ゲノム上に発見された。H24 年度には、*Tsukubamonas* mt ゲノムデータと大規模系統解析からの結果を合わせて投稿論文を作成する。

Tsukubamonas に関する研究は、科研費挑戦的萌芽研究「原始真核生物を求めて：新奇真核微生物の形態・発現遺伝子・ミトコンドリアゲノム解析」(代表・稲垣；課題番号 22657025) の支援をうけた。

(3) フォルニカータ生物群に属する嫌気性真核微生物種の解析

「フォルニカータ生物群」とは、病原性真核微生物 *Giardia intestinalis* に代表されるディ

プロモナス類と「カルペディエモナス様生物 (*Carpediemonas*-like organisms or CLOs)」と総称される自由生活性真核微生物種とで構成される。*Giardia* は嫌気環境へ適応する過程で、好気性 mt を機能不明の mt 由来オルガネラ・ミトソームへと改変したが、その進化の詳細は未解明である。従って、通常の mt から *Giardia* ミトソームへの機能変化を高精度の推測するためには、ディプロモナス類と各種 CLO s との系統関係を明確にすることと共に、CLO の mt 由来オルガネラがどのような機能を持つかを解明する必要がある。そこでカナダ・Dalhousie 大学の Alastair Simpson 博士、Andrew Roger 博士と共同で、各種 CLO の EST データの取得とその解析を計画した。この計画では、EST データを基にした大規模系統解析によりフォルニカータ生物群内部系統を高精度に推測し、トランスクリプトームにより CLO の mt 由来オルガネラ機能の推定が可能となる。

H23 年度には、2 種の CLO 株・*Dysnectes brevis* と未同定 NY0171 株から mRNA サンプルを調製し、イルミナシーケンスに供した。H24 年度以降、カナダ側の EST データと統合することにより CLO の mt 由来オルガネラの機能を解明する。さらにフォルニカータ生物群内での mt 機能の進化を解明するため、大規模系統解析により推定した系統樹を基盤に *Giardia* ミトソームとの機能比較を実施する。

【2】新奇真核生物の発見 (稲垣・神川)

(1) 新奇アメーバ状真核微生物 “トヤマアメーバ”

H23 年度 7 月に富山県魚津市ミラージュランド付近の海岸で砂サンプルを採集した。この砂サンプルを粗培養し、新奇アメーバ状真核微生物 “トヤマアメーバ” を単離した。“トヤマアメーバ” から小サブユニットリボソーム RNA 遺伝子と熱ショックタンパク質 90kDa (Hsp90) 遺伝子を決定し系統解析したが、この生物種が真核生物のどの系統群に所属するかははっきりしなかった。H24 年度以降も光学・電子顕微鏡をもちいた形態観察と分子系統解析を継続し、“トヤマアメーバ” の系統的位置を探る。

(2) 光合成をしない珪藻 *Nitzschia* sp.

珪藻類の大多数は葉緑体を持ち光合成を行う。しかし *Nitzschia* 属珪藻類の一部は二次的に光合成能を失った従属栄養性種が知られている。H23 年度に沖縄県石垣島のマングローブ林で採集した落ち葉上から光合成をしない「無色」珪藻 *Nitzschia* sp. を単離し、培養株化することに成功した。H24 年度以降、電子顕微鏡観察により光合成能を失った葉緑体 (白色体) の様態の観察、大規模配列解析による葉緑体ゲノム構造の解析や宿主 (珪藻) 細胞の EST 解析などを順次行っていく。

【3】分子系統解析の方法論研究 (田邊・稲垣・橋本／辻・佐藤 (高性能計算システム研究部門))

(1) 系統樹探索のための最適化アルゴリズムの構築

遺伝的アルゴリズムは工学・生物学など広範囲で利用されている最適化アルゴリズムである。

H23 年度には、遺伝的アルゴリズムを用いて進化系統樹を最適化するプログラムを一通り完成させ、性能評価として種々の配列データを用いたベンチマークテストを行った。またベンチマークの過程で明らかとなった改善点についてはプログラムの改良を行った。

(2) 最尤系統樹の信頼性評価バイアスの定量

通常分子系統解析では、ブートストラップ法により各分岐の出現確率を算出し、系統推定の信頼性・不確実性を評価する。最尤系統推定の場合、各反復の発見的探索における初期樹形と元データの最尤系統樹との間のトポロジカルな距離に依存し、系統樹の信頼性が過大あるいは過小評価されると予想できる。H22-23 年度にかけて、初期樹形と発見的樹形探索法がブートストラップ解析による出現確率に与えるバイアスの定量化を行った。

(3) 塩基組成の偏りがもたらすアーティファクト

一般に分子系統解析で用いられる“homogeneous”塩基置換モデルでは、配列間で塩基組成は大きく異なることを前提としている。しかし現実には生物種間、あるいは同一ゲノムの異なる領域間でも塩基組成が異なることがある。配列間の塩基組成が大きく異なる場合、homogeneous 置換モデルを適応した解析では、著しいモデル不整合が生じ、その結果誤った系統樹（アーティファクト）に導かれることが分かっている。この塩基組成の偏りに起因するアーティファクトを防ぐためには、これまでに大きく 2 種類の方法が提唱され、現存配列の解析に用いられてきた。すなわち、①配列データの 4 種類の塩基をピリミジン、プリンに書換えた後 homogeneous モデルで解析する RY コーディング解析と、②配列間の塩基組成の偏りを取り入れたより複雑な“non-homogeneous”モデル解析である。しかし、これまで RY コーディング解析や non-homogeneous モデル解析がどの程度の塩基組成の偏りに頑健であるか、シミュレーションデータを用いた検証は行われていなかった。

H23 年度には、塩基組成の偏りの程度を変えたシミュレーションデータを作成し、RY コーディング解析と non-homogeneous モデル解析の頑健性を詳細に検証した。その結果、両解析とも塩基組成の偏りに起因するアーティファクトを抑制することができるが、RY コーディング解析は配列の生成プロセスに依存してその頑健性が大きく変わることが明らかとなった。

3. 研究業績

(1) 研究論文

1. Matsumoto T, Shinozaki F, Chikuni T, Yabuki A, Takishita K, Kawachi M, Nakayama T, Inouye I, Hashimoto T, Inagaki Y. Green-colored plastids in the dinoflagellate genus *Lepidodinium* are of core chlorophyte origin. 2011 **Protist** 162:286-276.
2. Yabuki A, Nakayama T, Yubuki N, Hashimoto T, Ishida K, Inagaki Y. *Tsukubamonas globosa* n. g., n. sp., a novel excavate flagellate possibly holding a key for the early evolution in “Discoba.” 2010 **Journal of Eukaryotic Microbiology** 58:319-331.
3. Matsumoto T, Ishikawa SA, Hashimoto T, Inagaki Y. A deviant genetic code in the green alga-derived plastid in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. 2011 **Molecular**

Phylogenetics and Evolution 60:68-72.

4. Ishitani Y, Ishikawa SA, Inagaki Y, Tsuchiya M, Takahashi K, Takishita K. Multigene phylogenetic analyses including diverse radiolarian species support the "Retaria" hypothesis—the sister relationship of Radiolaria and Foraminifera. 2011 **Marine Micropaleontology** 162:268-276.
5. Kamikawa R, Inagaki Y, Hashimoto T. A novel spliceosome-mediated trans-splicing can change our view on the genome complexity of the divergent eukaryote *Giardia intestinalis*. 2011 **Biophysical Reviews** 3:193-197.
6. Kamikawa R, Inagaki Y, Roger AJ, Hashimoto T. Splintrons in *Giardia intestinalis*: Spliceosomal introns in a split form. 2011 **Communicative & Integrative Biology** 4:1-3.

(2) 学会発表 (発表者は太字)

(A) 招待講演 (すべて口頭発表)

1. Inagaki Y. Recent progress in placing newly-discovered lineages of protists in the deep tree of eukaryotes. 2011 年 8 月 6 日, CGAB (Center for Comparative Genomics and Evolutionary Bioinformatics) meeting, Dalhousie University, Halifax, Canada.
2. Yabuki A, Kamikawa R, Kolisko M, Ishikawa SA, Ishida K, Simpson AGB, Roger AJ, Inagaki Y. *Tsukubamonas globosa* is a deep-branching member in the Discoba clade: Morphology, phylogenomics, and mitochondrial genome. 2011 年 9 月 6-11 日, IUMS2011 (International Union of Microbiological Societies 2011 Congress), 札幌コンベンションセンター, 札幌, 北海道.
3. **Kamikawa R**, Inagaki Y, Roger AJ, Hashimoto T. *Trans*-splicing of split introns is required for the expressions of indispensable genes in *Giardia intestinalis*. 2011 年 9 月 6-11 日, IUMS2011 (International Union of Microbiological Societies 2011 Congress), 札幌コンベンションセンター, 札幌, 北海道.
4. 稲垣祐司, 矢吹彬憲、神川龍馬. 新奇真核微生物からの大規模配列データで変貌し続ける、我々の真核生物大系統像. 2011 年 11 月 25 日, 第 31 回微生物系統分類研究会, 理化学研究所, 和光, 埼玉.
5. 稲垣祐司、中山卓郎、笠井文絵、大河内直彦. 珪藻細胞中の窒素固定に特化したオルガネラ「橢円体」: オルガネラ獲得過程理解にむけた新たなモデル. 2011 年 12 月 13-16 日, 第 34 回日本分子生物学会年会 パシフィコ横浜, 横浜, 神奈川.

(B) その他の学会発表

1. 稲垣祐司. 真核生物ゲノムの可塑性: 渦鞭毛藻類葉緑体関連遺伝子の起源を例に. (Oral) 2011 年 5 月 22-27 日, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会 千葉・幕張メッセ国際会議場.
2. 中山卓郎、池上裕子、中山剛、井上勲、稲垣祐司、笠井文絵. Rhopalodia 科珪藻に見られ

- る細胞内共生シアノバクテリアの起源と分子進化. (Poster) 2011 年 5 月 22-27 日, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会 千葉・幕張メッセ国際会議場.
3. 矢崎裕規、神川龍馬、松本拓也、橋本哲男、稲垣祐司. 渦鞭毛藻 *Lepidodinium* 「葉緑体型」 GAPDH 遺伝子の転写活性比較. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 4. 西村祐貴、神川龍馬、稲垣祐司、橋本哲男. ミトコンドリア 7 遺伝子に基づくカタブレフアリス類 *Leucocryptos marina* の系統的位置. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 5. 矢吹彬憲、神川龍馬、Martin Kolisko、石田健一郎、田辺晶史、橋本哲男、稲垣祐司. 159 遺伝子データに基づく従属栄養性真核微生物 *Palpitomonas bilix* の系統的位置. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 6. 神川龍馬、矢吹彬憲、Martin Kolisko、西村祐貴、石川奏太、石田健一郎、橋本哲男、Andrew J Roger、Alastair GB Simpson、稲垣祐司. *Tsukubamonas globosa* の Phylogenomic 解析と部分的ミトコンドリアゲノム配列. (Poster) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 7. 石谷佳之、石川奏太、稲垣祐司、土屋正史、瀧下清貴. 複数遺伝子解析により得られた放散虫と有孔虫の姉妹関係. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 8. 神川龍馬、稲垣祐司、Andrew J Roger、橋本哲男. 寄生性真核微生物 *Giardia* の縮退ゲノムにおける複雑な遺伝子発現. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 9. 神川龍馬、稲垣祐司. 真核生物における翻訳伸長因子 EF-1alpha および翻訳伸長因子様タンパク質 EFL の進化. (Poster) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 10. 松本拓也、神川龍馬、橋本哲男、稲垣祐司. 緑色渦鞭毛藻類 *Lepidodinium chlorophorum* が持つ共生体退化核遺伝子について. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 11. 小松崎洋志、瀧下清貴、Marin Kolisko、矢吹彬憲、雪吹直史、稲垣祐司、橋本哲男、Andrew J Roger、Alastair GB Simpson. ミトコンドリアをもたないプロティスト分類群 'Fornicata' の分子系統: 複数遺伝子に基づく解析. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 12. 石川奏太、稲垣祐司、橋本哲男. Red vs. Green: Apicomplexa 類における退化型葉緑体 apicoplast の起源に関する分子系統学的研究. (Oral) 2011 年 7 月 11 日, 第 5 回日本進化原生生物学研究会富山・富山・富山大.
 13. Kamikawa R, Inagaki Y, Roger AJ, Hashimoto T. Spliceosomal introns in a split form: Another aspect of intron evolution in eukaryotes. (Poster) 2011 年 7 月 26-30 日,

SMBE2011 京都・京都・京都大学.

14. Nishimura Y, Kamikawa R, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**. The phylogenetic position of the katablepharid *Leucocryptos marina* based on seven mitochondrial gene sequences. (Poster) 2011 年 7 月 26-30 日, SMBE2011 京都・京都・京都大学.
15. Yazaki Y, Kamikawa R, Matsumoto T, **Hashimoto T**, **Inagaki Y**. Difference in transcriptional regulation between two genes encoding plastid-targeted GAPDH in the dinoflagellate *Karenia mikimotoi*. (Poster) 2011 年 7 月 26-30 日, SMBE2011 京都・京都・京都大学.
16. Ishikawa S, Kamikawa R, **Inagaki Y**. Intragenomic gene conversion in the evolution of bacterial peptide-chain release factors. (Poster) 2011 年 7 月 26-30 日, SMBE2011 京都・京都・京都大学.
17. Tanabe AS, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**, Tsuji M, Sato M. Effective bootstrapping: A new method for estimating accurate credibilities of splits on a phylogenetic tree. (Poster) 2011 年 7 月 26-30 日, SMBE2011 京都・京都・京都大学.
18. Komatsuzaki H, Takishita K, Kolisko M, Yabuki A, Roger AJ, Simpson AGB, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**. Molecular phylogeny of the amitochondriate lineage, Fornicata, based on multi-gene analysis. (Poster) 2011 年 7 月 26-30 日, SMBE2011 京都・京都・京都大学.
19. 石谷佳之, 石川奏太、**稲垣祐司**、土屋正史、瀧下清貴. (Oral) 複数遺伝子解析により明らかとなった放散虫と有孔虫の姉妹関係. 2011 年 10 月 29-30 日, 第 11 回放散虫研究集会 愛媛・松山・愛媛大学.
20. 長安英治, 石川奏太、竹谷茂、**稲垣祐司**、吉田彩子、丸山治彦. 糞線虫の持つ細菌様フェロケラターゼ遺伝子の同定. (Oral) 2012 年 3 月 23-24 日, 第 81 回日本寄生虫学会大会 兵庫・西宮・兵庫県立大学.

4. シンポジウムの開催

なし

V. 地球環境研究部門

1. メンバ

教授 田中博（センター勤務）、木村富士男（学外共同研究員 JAMSTEC）、
鬼頭昭雄（学外共同研究員 気象研究所）
准教授 日下博幸（センター勤務）、植田宏昭（学内共同研究員）
助教 若月泰孝（学内共同研究員）
研究員 寺崎康児（センター勤務）

2. 概要

地球環境学部門における主な活動としては、昨年度に引き続き全球雲解像モデル NICAM (G1=10) の 7km 解像度モデルによる大規模計算を T2K-Tsukuba システムを用いて行った結果の解析を進めたことがあげられる。2008 年 9 月を初期値とした 2 週間ランと 2009 年 1 月を初期値とした 2 週間ランの夏冬の事例の数値実験の解析を継続した。この他に 14 km 解像度 (G1=9) のデータを用いて北極振動、北極低気圧、温帯低気圧、ブロッキング、熱帯低気圧などの研究を行った。その成果のいくつかは Polar Science に投稿され、一部がすでに受理されている。特に北極低気圧の 3 次元構造について、NICAM による数値実験の結果と気象庁全球 η 面ガウス格子 (20 km 格子) の解析値とを比較した。極渦による大規模場からの渦度の供給と北極前線ジェットの傾圧性により発達するメソ低気圧の極渦との併合が重要であることを見出した。大気大循環の 3D ノーマルモード展開による全球重力波ワールドの解析により、新たな知見の研究成果が得られている。大気大循環研究と並んで領域気象モデル WRF を用いた都市気候シミュレーションが行われ、都市気候の将来予測、多治見猛暑の実態調査を推進したほか、建物解像 LES モデルの開発をセンター内共同研究として手掛け、都市キャノピーモデルの改良に役立てられた。地球環境学分野として査読付き研究論文 16 編、学会発表等 47 件が行なわれた。

3. 研究成果

【1】都市気候の将来予測

(1) 温暖化影響評価研究者のためのダウンスケーリング（日下）

IPCC による A1b と B1 シナリオ下での地球温暖化予測データを用いて、ダウンスケーリングにより 2031-2050 年平均と 2081-2100 年平均の日本領域の詳細な気候予測計算を実施した。温暖化予測データには、3つの異なる GCM (日本の気象研究所のモデル、東京大学・国立環境研究所・海洋研究開発機構のモデル、オーストラリア連邦科学産業研究機構のモデル) による予測実験結果を用いた。このシステムを用いることで、日本周辺の任意の領域で、10~30 km 解像度のダウンスケールが可能となり、GUI による直観的な操作により研究効率の向上が図られた。本研究は環境省 S8 プロジェクトの一環として実施され、本センターの建部、川島が開発に協力した。図はダウンスケーリングベータ版の第 2 領域と、そこにネスティングされた第 3 領域の例を示す。また、実際に気温分布の詳細を表示した例を示す。

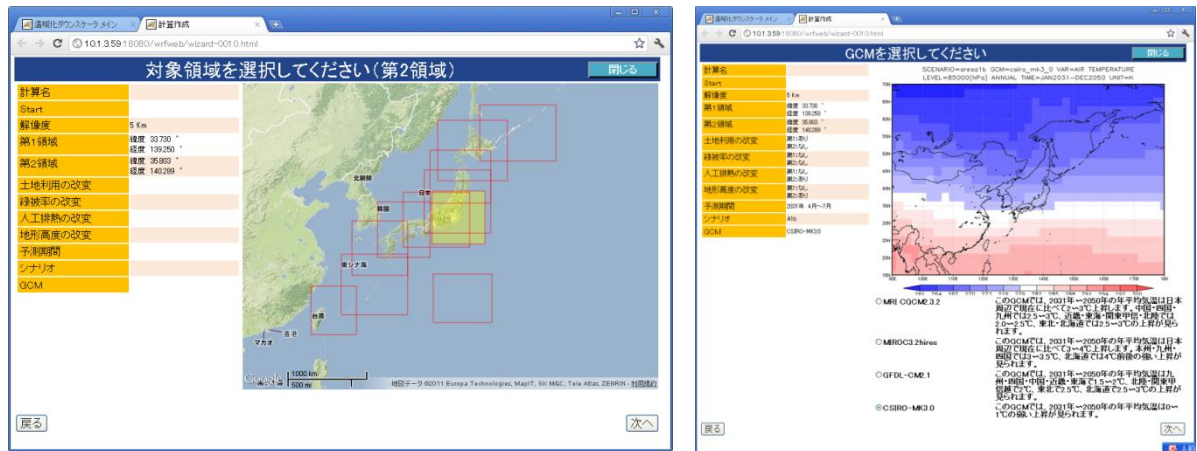


図1 領域気候モデル WRF による第 2 領域と、そこにネスティングされた第 3 領域の例(左図)と、実際にダウンスケーリングにより予測された気温分布の例(右図)。

(2) 多治見市と本センターとの連携協定による多治見猛暑の解明 (日下)

多治見(岐阜県)は熊谷(埼玉県)と並んで国内最高気温を記録したことで知られ、その実態調査、要因解明、将来予測、そして緩和策の提言が研究課題となっている。猛暑の背景には夏季の太平洋高気圧の発達による放射加熱に加えて、山岳を駆け下りるドライフェーンが重要とされるが、これらに加えて山岳を吹走する際に境界層内で生じる非断熱加熱が第 3 のフェーンのメカニズムとして注目されている。

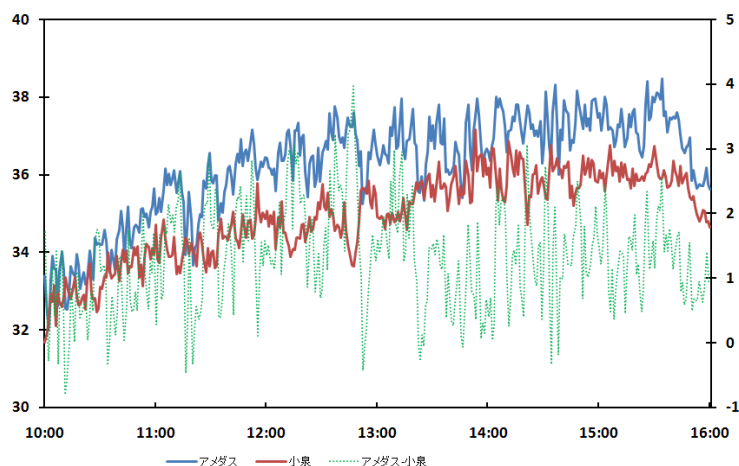
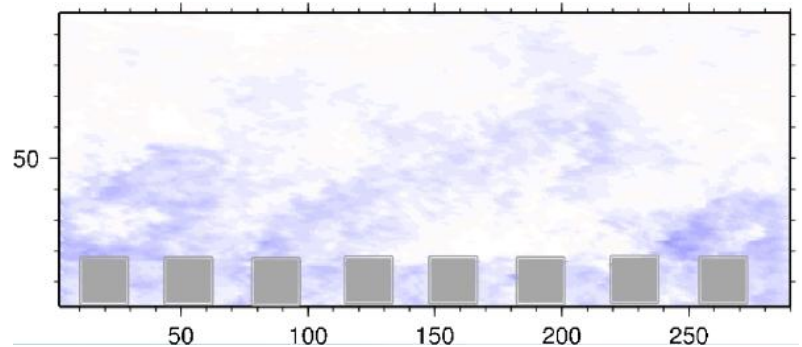


図 2 実態調査を行った 2011 年夏の多治見アメダス観測地(青)と小泉での実測(赤)、両者の差(緑、右座標)の時系列の例(左図)と AWS による現地観測風景の例(右図)。

(3) 建物解像並列 LES モデルの共同開発 (日下)

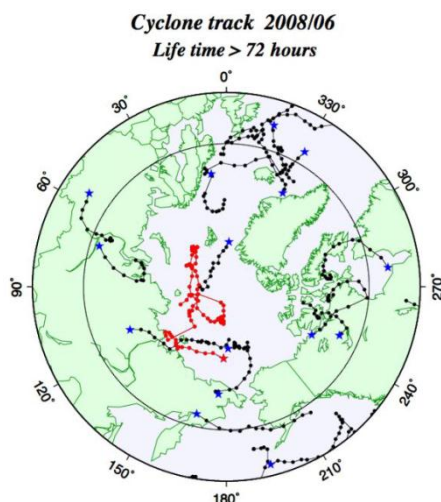
都市気候の詳細な研究では、モデルの空間解像度を数十メートルとする必要があり、都市キャノピーモデルに代えてビルなどの建物をあらわに表現した Large Eddy Simulation (LES)モデルの開発が必要になる。このモデルでは粘性流体の大規模渦を陽に計算する流体力学のコアの構築が必要となり、並列計算やGPUを用いた新たな流体力学フレームの開発に着手している。本研究は文科省 RECCA プロジェクトの一環として行われ、本センターの計算機科学の研究者の協力を得た共同開発を推進している。

図 3 都市気候研究のために、ビルなどの建物を陽に取り込んだ Large Eddy Simulation (LES)モデルを用いて行った大気境界層(接地層)に見られる乱流の発生実験。



【2】 NICAM を用いた北極低気圧の数値実験とその解析 (田中、寺崎)

北極気候変動研究は近年の地球温暖化研究の最前線として位置付けられ、文科省グリーン事業の一環で北極気候変動研究プロジェクトが 2011 年度から開始されている。北極海の海氷の減少は、地球温暖化の研究課題として重要であると同時に、北極海周辺の天然資源の発掘や北極航路の開拓という経済的理由からも注目されている。北極海の海氷の消長には、ボーフォート高気圧と対をなし、北極海ダイポール気圧配置をもたらす北極低気圧の存在が重要であり、その成因解明と動向予測に注目が集められている。本研究では、全球雲解像モデル NICAM を用いて行った 2008 年 6 月の北極低気圧の 3 次元構造を、気象庁全球 η 面ガウス解析値の構造と比較した。この北極低気圧(左図の赤線)は北極海上を 20 日以上も迷走した低気圧で、温帯低気圧とは異なる特徴や構造を持つ。NICAM による数値実験の結果では、中心の低気圧性の渦度は対流圏上層の極渦と一体化した順圧構造を持ち、極渦周辺の北極前線の傾圧性により対流圏下層で発達したメソ低気圧と併合を繰り返すことで長期間持続していることを示している。



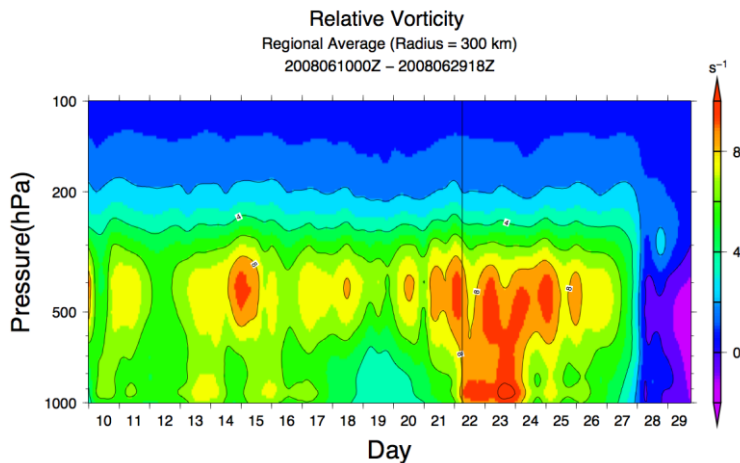


図 4 2008 年 6 月に発生し北極海上を迷走する北極低気圧(赤線)の中心位置(左図)と、低気圧の中心周辺で平均した相対渦度の時間鉛直断面図(右図)。

【3】 地球温暖化を人為起源と自然変動(特に北極振動)に分離する研究 (田中、寺崎)

IPCC による地球温暖化の主因は人為的な二酸化炭素の増大とされているが、仮に二酸化炭素が一定でも太陽放射の変化や火山活動などの自然変動、さらにはそれらが一定でも大気海洋海氷システムのフィードバックの結果として変動する内部変動が自然界には存在する。これらの自然変動(内部変動)を人為起源の地球温暖化と定量的に分離し、気候モデルによる温暖化の将来予測を再検討することは重要である。本研究では、温暖化が特に顕著な北半球の地上気温の時系列を主成分(EOF)に分解した結果、EOF-1 の構造(中図)は内部変動としてカオス的に変化する北極振動の構造(左図)と一致することを見出した。シベリアと北米で気温偏差が正の時にグリーンランド付近で負偏差となるのが特徴である。スコア時系列は 1970 年代に負、1990 年代に正、そして近年は負となっている。一方、EOF-2 の構造は北極海を中心に正の値が分布し、人為起源の温暖化がアイス・アルベドフィードバックにより海氷激減と連動して増幅し、IPCC で示されている北極温暖化増幅(Arctic Amplification)の構造と一致する。EOF-2 の分散は EOF-1 の半分程度である。IPCC による気候モデルは、1970~1990 年代の自然変動を含めてチューニングされている。こうした過去の気温変化の再現の成功を根拠に 100 年後の温暖化予測を行っているため、この温暖化予測は過大評価になっていることを本研究の結果は示唆している。国策として温暖化対策を推進する中で、重要な研究結果と考えられる。

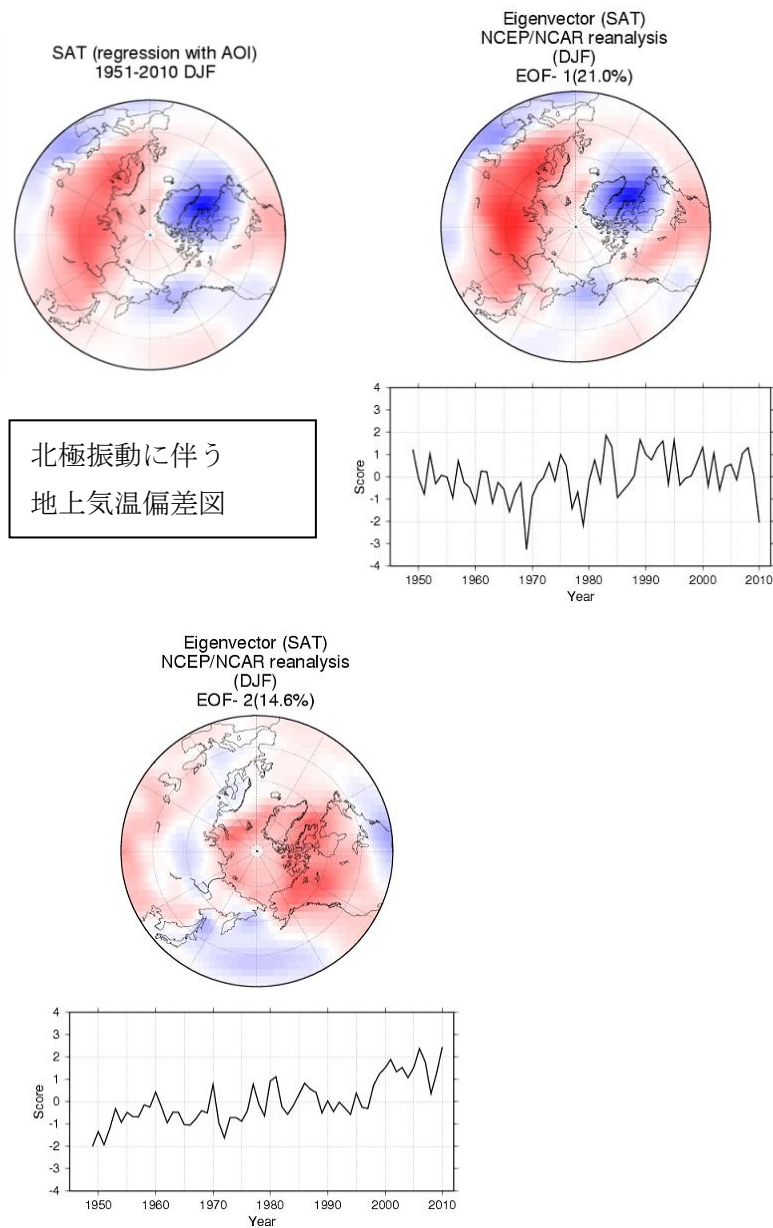


図 5 北極振動指数に回帰した地上気温の分布(左図)と、地上気温の 1950 年以降の時系列の EOF-1 (中図)、EOF-2(右図)の分布、およびそれらのスコア時系列。

【4】 3D ノーマルモードによる順圧傾圧不安定解析と北極振動の特異固有解理論 (田中)

静止大気を基本場とする全球大気のノーマルモードは、大気潮汐理論により Hough 関数としてその解が知られている。これは非線形大気流体力学のハミルトニアンシステムを、基本場に重なる微小擾乱として線形化することで求まる解析解である。基本場が鉛直子午面で変化する帯状平均気候値の場合、基本場からエネルギーを受け取り増幅する傾圧不安定が発生し、それが中緯度の温帯低気圧を発達させる。本研究では、静止大気における 3D ノーマルモードを正規直交基底とした 3D スペクトルモデルを構築し、東西方向にも変化する 3 次元的な気候値を基本場とした線形方程式の固有値問題を解くこと

で、順圧傾圧不安定理論の一般化を行った。複素数となる固有値のスペクトルを、横軸に振動数、縦軸に増幅率をとって表すと、低周波側に増幅率最大の傾圧不安定が解析され(左図)、ライフサイクルを伴い東西方向に変化する傾圧不安定波動の構造が解析された。このスペクトルの中で、実数固有値(つまり定在波)となる順圧不安定解に北極振動の元となる解が存在し、さらに粘性摩擦と地表摩擦を導入することで、その増幅率がゼロ(つまり中立波)となり、固有値ゼロの特異固有解として北極振動の構造が見られた(右図)。北極振動は東西に変化する基本場の順圧不安定が成因であり、傾圧基本場においてもその存在が実証された大気大循環の固有モードである。

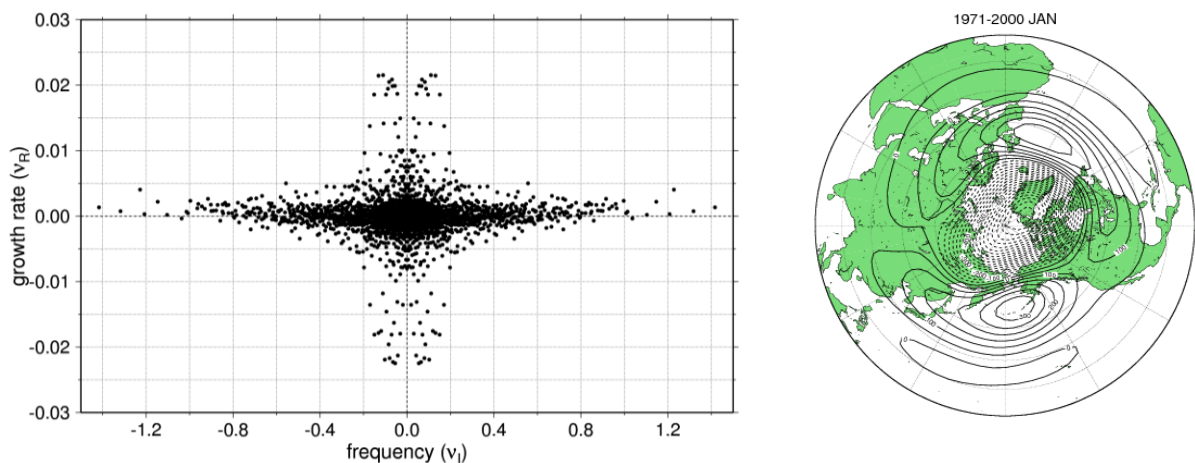


図6 3次元に変化する気候値を基本場とする線形システムの固有値のスペクトル分布(左図)と、順圧不安定により原点付近の実数固有として得られる北極振動の固有解の順圧高度場(右図)。

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Kusaka, H., Y. Miya, and R. Ikeda, 2011 : Effects of Solar Radiation Amount and Synoptic-scale Wind on the Local Wind “Karakaze” over the Kanto Plain in Japan. *J. Meteor. Soc. Japan.*, 89, 327-340. (査読付)
2. Takane, Y. and H. Kusaka, 2011 : Formation mechanism of the extreme high surface air temperature of 40.9°C observed in the Tokyo metropolitan area: considerations of dynamic foehn and foehn-like wind. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, 50, 1827-1841. (査読付)
3. Kusaka, H., Chen, F., Tewari, M., Dudhia, J., Gill, D., Duda, M. G., Wang, W., Miya, Y., 2012: Simulating the Urban Heat Island Effect, and Diagnosing the Discomfort Index and Wet-Bulb Globe Temperature with a 4-km WRF Model: An Inter-Comparison Study between the Urban Canopy Model and Slab Model. *J. Meteor. Soc. Japan.*, in press. (査読付)
4. Kusaka, H., Hara, M., Takane, Y., 2012: Urban climate projection by the WRF model

- at 3-km horizontal grid increment: Dynamical downscaling and predicting heat stress in the 2070' s August for Tokyo, Osaka, and Nagoya metropolies. *J. Meteor. Soc. Japan.*, in press. (査読付)
5. Ishizaki, N. N., Takayabu, I., Oh'izumi, M., Sasaki, H., Dairaku, K., Iizuka, S., Kimura, F., Kusaka, H., Adachi, S. A., Kurihara, K., Murazaki, K., Tanaka, K., 2012: Improved performance of simulated Japanese climate with a multi-model ensemble. *J. Meteor. Soc. Japan.*, in press. (査読付)
 6. Ishizaki, N. N., Shiogama, H., Takahashi, K., Emori, S., Dairaku, K., Kusaka, H., Nakaegawa, T., Takayabu, I., 2012: An Attempt to Estimate of Probabilistic Regional Climate Analogue in a Warmer Japan. *J. Meteor. Soc. Japan.*, in press. (査読付)
 7. 井原智彦, 日下博幸, 原政之, 松橋隆治, 吉田好邦, 2011 : 問題比較型影響評価手法を用いた都市気温上昇に伴う軽度の健康影響の推定. 日本建築学会環境系論文集, 76, 459-467. (査読付)
 8. 飯塚悟, 金原和矢, 日下博幸, 原政之, 2011 : 2070 年代夏季温熱環境の長期トレンド予測ー領域気象モデル WRF による名古屋都市圏の温熱環境シミュレーション(その2). 日本建築学会環境系論文集, 76, 425-430. (査読付)
 9. 中津留高広, 林陽生, 上野健一, 植田宏昭, 辻村真貴, 浅沼順, 日下博幸, 2011 : 筑波山(男体山)の過去 100 年間における気温の長期変化. 天気, 58(12), 1055-1061. (査読付)
 10. 日下博幸, 2011 : 領域気象モデル WRF の都市気候研究への応用と課題. 地学雑誌, 120(2), 285-295.
 11. 日下博幸, 2011 : ヒートアイランド気象学事始め(第 5 回). 日本ヒートアイランド学会誌, 6, 42-45.
 12. 日下博幸, 2011 : 局地風の数値シミュレーション. 気候影響・利用研究会会報, 29, 5-11.
 13. 日下博幸, 2012 : 都市の熱汚染(Urban Thermal Environment and Disaster). 計算工学, 17(1), 3-6.
 14. 日下博幸, 2011 : 局地風の報告. 気候影響・利用研究会会報, 29, 3.
 15. Terasaki, K., H. L. Tanaka, and N. Zagar 2011: Energy spectra of Rossby and gravity waves. SOLA, 7, 45-48. (査読付)
 16. Hirata, Y., Y. Shimo, H. L. Tanaka, and K. Aihara 2011: Chaotic properties of the Arctic Oscillation index. SOLA, 7, 33-36. (査読付)
 17. Seki, S., H. L. Tanaka, and F. Fujiwara 2011: Modification of the baroclinic instability associated with positive and negative Arctic Oscillation index: A theoretical proof of the positive feedback. SOLA, 7, 53-56. (査読付)
 18. 田中博, 2011: 身近な気象の事典. 新田尚監修・(分担執筆) 日本気象予報士会編, 279 pp.
 19. Zagar, N., K. Terasaki, and H. L. Tanaka 2011: A note on large-scale inertio-gravity energy estimated in the atmosphere. (Accepted in Mon. Wea. Rev.) (査読付)

20. Sang-Min Lee, Hi-Ryong Byun, and Hiroshi L. Tanaka 2011: Tempo-spatial characteristics of drought occurrences over Japan. (Accepted in APJAS) (査読付)
21. Nagato, Y. and H. L. Tanaka 2012: Estimation of global warming trend without the contributions from decadal variability of the arctic oscillation. (Accepted in Polar Science) (査読付)
22. Aizawa, T. , H. L. Tanaka, and M. Satoh 2012: Rapid arctic cyclogenesis by the cloud resolving global model NICAM. (Submitted to Polar Science)
23. Tanaka, H. L., A. Yamagami, and S. Takahashi 2012: The structure and behavior of the arctic cyclone in summer analyzed by the JRA-25 JCDAS data. (Accepted in Polar Sciences) (査読付)

(2)学会発表

(A)招待講演

1. Tanaka, H.L. 2012: Arctic Oscillation as a dynamical eigen-solution of the primitive equation of the atmosphere. 2011 Alaska Weather Symposium, Mar. 2012, University of Alaska, Fairbanks.

(B)その他の学会発表

2. Ninomiya, J., N. Mori, and H. Kusaka, 2011 : INFLUENCE OF SEA SURFACE TEMPERATURE ON COASTAL URBAN AREA -CASE STUDY IN OSAKA BAY, JAPAN-. *Sixth International Conference on Asian and Pacific Coasts (APAC2011)*, 14-16 December, 2011 , Hong Kong, China.
3. Aoyagi, T., S. A. Adachi, H. Kusaka, K. Tanaka, and N. Seino, 2011 : Near-term prediction of urban climate based on urban growth scenarios in the Tokyo metropolitan area. *Fifth Korea-Japan-China Joint Conference on Meteorology*, Busan, Korea.
4. Kusaka, H., M. Hara, and Y. Takane, 2011 : Urban climate projection in summer in the 2070s by the WRF model with 3-km horizontal grid increment: Dynamical downscaling and impact assessment to heat stress. *Third international workshop on down-scaling*, Tsukuba, Japan.
5. Kusaka, H., 2011 : Simple DDS schme in S-8 projects. *Third international workshop on down-scaling*, Tsukuba, Japan.
6. Ishizaki, N., H. Shiogama, K. Takahashi, S. Emori, K. Dairaku, H. Kusaka, T. Nakaegawa, and I. Takayabu, 2011 : Probabilistic Regional Climate Analogue in the Warmer Japan. *Third international workshop on down-scaling*, Tsukuba, Japan.
7. Kusaka, H., S. Adachi, M. Ueno, Y. Yamagata, I. Takayabu, M. G. Duda, Y. Akimoto, Y. Takane, M. Hara, and J. Dudhia, 2011 : Urban Climate Projection in 2050s and 2070s by the WRF model with 3-km Horizontal Resolution. *International Workshop on Urban*

- Weather and Climate : Observation and Modeling* , 12-15 July, 2011 , Beijing, China
8. Ikeda, R., H. Kusaka, S. Iizuka, and T. Boku, 2011 : Development of Local Meteorological Model based on LES Model. *International Workshop on Urban Weather and Climate : Observation and Modeling* , 12-15 July, 2011 , Beijing, China.
 9. Yoshikane, T., M. Tsugawa, F. Kimura, and H. Kusaka, 2011 : Impacts of the sea surface temperature of the inner bay on the local climate using a regional atmospheric model. *IUGG(International Union of Geodesy and Geophysics Conference) 2011*, 28 June - 7 July 2011 , Melbourne, Australia.
 10. 池田亮作, 日下博幸, 飯塚悟, 朴泰祐, 2011:一般曲線座標系による並列 LES モデルの開発. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 147-147. 東京.
 11. 大島一洋, 木村富士男, 日下博幸, 足立幸穂, 水田亮, 鬼頭昭雄, 2011:20km-AGCM における冬季日本周辺域の低気圧活動の再現性および将来変化. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 394-394, 東京.
 12. 平田航, 日下博幸, 2011 : 二つ玉低気圧通過に伴う降雨・降雪の気候学的研究. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 407-407, 東京.
 13. 阿部紫織 , 日下博幸, 高木美彩, 岡田牧, 高根雄也, 富士友紀乃, 永井徹, 2011 : 多治見市における夏季の気温分布の実態調査(その 1). 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 347-347, 東京.
 14. 池守春奈, 日下博幸, 岡田牧, 池田亮作, 2011 : 筑波大学学内におけるヒートアイランド観測. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 348-348, 東京.
 15. 日下博幸, 小松美智, 中村美紀, 酒井敏, 2011 : つくば市における 2010 年冬季・夏季の気温分布の実態. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 310-310, 東京.
 16. 高根雄也, 大橋唯太, 日下博幸, 重田祥範, 亀卦川幸浩, 2011 : 日本で最も暑い京阪地域における夏季高温の実態調査と形成要因の解明. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 182-182, 東京.
 17. 水成真由美, 日下博幸, 横山仁, 2010 : 東京都で発生する夏季の短時間強雨の気候学的研究. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 293-293, 東京.
 18. 日下博幸, 縄田恵子, 2011 : 降水に対する都市効果の検証ーアンサンブル気候実験ー. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 183-183, 東京.
 19. 上野正博, 日下博幸, 足立幸穂, 原政之, 2011 : 関東地方における過去 30 年間の気候変化シミュレーション. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 357-357, 東京.
 20. 石崎紀子, 高藪出, 大楽浩司, 飯塚聡, 足立幸穂, 木村富士男, 日下博幸, 田中賢治, 2011 : 20km 格子マルチ RCM による温暖化時の日本の地域気候変動. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 359-359, 東京.
 21. 岡田牧, 木村富士男, 日下博幸, 2011 : 夏季日中における小規模緑地が近隣街区の気温に与える影響. 日本気象学会 2011 年度春季大会予稿集, 312-312, 東京.

22. 高根雄也, 日下博幸, 高木美彩, 岡田牧, 阿部紫織, 永井徹, 富士友紀乃, 2011 : 岐阜県多治見市における夏季晴天日の暑熱環境の実態調査と領域気象モデル WRF を用いた予測実験—物理モデルと水平解像度に伴う不確実性の検討—. 日本ヒートアイランド学会第 6 回全国大会予稿集, 146-147, つくば.
23. 岡田牧, 日下博幸, 木村富士男, 2011 : 夏季日中における小規模緑地が周囲街区の気温に与える影響. 日本ヒートアイランド学会第 6 回全国大会予稿集, 116-117, つくば.
24. 阿部紫織, 日下博幸, 高木美彩, 岡田牧, 高根雄也, 富士友紀乃, 永井徹, 2011 : 多治見市における夏季の気温分布の実態調査(その 1). 日本ヒートアイランド学会第 6 回全国大会予稿集, 144-144, つくば.
25. 水成真由美, 日下博幸, 横山仁, 2011 : 東京都で発生する短時間強雨の統計解析—降水分布の特徴の把握—. 日本ヒートアイランド学会第 6 回全国大会予稿集, 58-58, つくば.
26. 古橋奈々, 日下博幸, 横山仁, 2011 : 東京 23 区で真夏日の午後に観測された短時間強雨の実態調査—降水分布の特徴の把握—. 日本ヒートアイランド学会第 6 回全国大会予稿集, 59-59, つくば.
27. 伊藤奨, 黒木美早衣, 日下博幸, 飯塚悟, 金原和矢, 2011 : 多治見猛暑の要因解明のための感度解析—WRF による名古屋都市圏温熱環境・風環境シミュレーション(その 6). 2011 年度日本建築学会大会(関東)学術講演会建築デザイン発表会プログラム, 210-210, 東京.
28. 伊藤奨, 黒木美早衣, 日下博幸, 飯塚悟, 金原和矢, 2011 : 多治見猛暑の要因解明のための感度解析—WRF による名古屋都市圏温熱環境・風環境シミュレーション(その 5). 2011 年度日本建築学会大会(関東)学術講演会建築デザイン発表会プログラム, 139-139, 東京.
29. 高橋佑輔, 飯塚悟, 伊藤奨, 原政之, 黒木美早衣, 金原和矢, 日下博幸, 2011 : 2030 年代・2050 年代・2070 年代における将来予測の比較—WRF による名古屋都市圏温熱環境・風環境シミュレーション(その 4). 2011 年度日本建築学会大会(関東)学術講演会建築デザイン発表会プログラム, 139-139, 東京.
30. 池田亮作, 日下博幸, 飯塚悟, 朴泰祐, 2011 : 複雑地形・都市街区を対象にした LES 気象モデルの開発. 日本流体力学会年会 2011 予稿集, 246-246, 東京.
31. 平野光, 多田野寛人, 櫻井鉄也, 池田亮作, 日下博幸, 2011 : 局地気象シミュレーションで現れる線形方程式に対する前処理の評価. 日本応用数理学会 2011 年度年会予稿集, 388-388, 京都.
32. 高根雄也, 大橋唯太, 日下博幸, 重田祥範, 亀卦川幸浩, 2011 : 日本で最も暑い京阪地域における夏季高温の実態調査と形成要因の解明. 日本地理学会 2011 年秋季学術大会予稿集, 219-219, 大分.
33. 秋本祐子, 日下博幸, 2011 : 次世代の気象モデルを用いた境界層雲・霧の数値シミュレーション. 日本地理学会 2011 年秋季学術大会予稿集, 218-218, 大分.
34. 二星義裕, 朴泰祐, 塙敏博, 池田亮作, 日下博幸, 飯塚悟, 2011 : 気象モデルの高解像度計算の GPU 化. 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング(HPC), 1-6(巻 :

2011-HPC-131, 号 : 2), 京都.

35. 加藤隆之, 日下博幸, 2011 : 湖盆地形における湖陸風循環モデルの開発. 第 13 回非静力学モデルに関するワークショップ予稿集, 86-86, 長岡.
36. 二星義裕, 朴泰祐, 塙敏博, 池田亮作, 日下博幸, 2011 : 高解像度 LES 計算の GPU による高速化と性能評価. 第 13 回非静力学モデルに関するワークショップ予稿集, 82-83, 長岡.
37. 池田亮作, 日下博幸, 飯塚悟, 朴泰祐, 2011 : 都市街区を対象にした並列 LES 気象モデルの開発. 第 13 回非静力学モデルに関するワークショップ予稿集, 79-80, 長岡.
38. 二星義裕, 池田亮作, 朴泰祐, 日下博幸, 2011 : 高解像度 LES 計算の GPU による計算加速. 日本気象学会 2011 年度秋季大会講演予稿集, 329-329, 名古屋.
39. 池田亮作, 日下博幸, 飯塚悟, 朴泰祐, 2011 : 都市街区を対象にした並列 LES 気象モデルの開発. 日本気象学会 2011 年度秋季大会講演予稿集, 44-44, 名古屋.
40. 高藪出, 大楽浩司, 日下博幸, 田中賢治, 西森基貴, 鼎信次郎, 稲津将, 2011 : マルチモデルアンサンブルとダウンスケーリングの研究(S-5-3). 日本気象学会 2011 年度秋季大会講演予稿集, 330-330, 名古屋.
41. 二星義裕, 朴泰祐, 池田亮作, 日下博幸, 2012 : 高解像度 LES 計算の GPU による計算加速. ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, 2012, 73-73, 名古屋.
42. 西曉史, 日下博幸, 2012 : 空っ風のメカニズム解明のための局地気象モデル開発. 日本地理学会 2012 年春季学術大会(予稿投稿済), 東京.
43. 岡田牧, 岡田益己, 日下博幸, 2012 : WBGT 算出のための黒球温度推定式の比較評価. 日本地理学会 2012 年春季学術大会(予稿投稿済), 東京.
44. 日下博幸, 足立幸穂, 藤田恵子, 飯島奈津美, 井原智彦, 飯泉仁之直, 原政之, 山形与志樹, 2012 : 首都圏の夏季気候の将来予測と健康影響評価. 日本地理学会 2012 年春季学術大会(予稿投稿済), 東京.
45. 高根雄也, 日下博幸, 2012 : 過去 22 年間に関東平野内陸域で観測された極端な高温現象発生時のメソスケールの特徴. 日本地理学会 2012 年春季学術大会(予稿投稿済), 東京.
46. 池田亮作, 日下博幸, 飯塚悟, 朴泰祐, 2012 : 都市街区を対象にした並列都市 LES 気象モデルの開発. 日本地理学会 2012 年春季学術大会(予稿投稿済), 東京.
47. 加藤隆之, 日下博幸, 2012 : 夜間の二次元局地気流モデルの開発と陸風・斜面下降流への適用ー洞爺湖を例としてー. 日本地理学会 2012 年春季学術大会(予稿投稿済), 東京.

5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

センター内連携 : LES-GPU グループ

大規模気象計算 WG

産学官連携 : 岐阜県多治見市と連携協定

国際活動： 米国大気研究センター訪問
米国アラスカ大学訪問
アラスカ大学との大学間協定
北極環境研究コンソーシアム
北極科学会議 (IASC) 副議長

VI. 高性能計算システム研究部門

教授 佐藤 三久, 朴 泰祐, 児玉 祐悦

准教授 建部 修見, 高橋 大介, 塙 敏博

助教 多田野 寛人

2. 概要

本研究グループは、高性能計算システムアーキテクチャ、並列プログラミング環境、GPU利用技術、並列数値処理の高速化研究、広域分散環境におけるデータ共有を中心とするグリッド計算技術等の研究を行っている。

3. 研究成果

【次世代並列処理言語 XcalableMP の研究開発】(佐藤)

E-Science プロジェクト「並列プログラミング言語に関する研究開発」において、分散メモリ構成を基本とする大規模並列処理システムにおける並列 HPC アプリケーションのため、並列プログラミング言語 XcalableMP (XMP) の開発を行った。プロジェクト最終年度として、C 及び Fortran の ver1.0 仕様の確定とアナウンス、C 言語コンパイラの実装を主に行った。言語仕様においては、特に従来の分散メモリ型並列システムを対象にした基本数値計算ライブラリである SCALapack や MPI-IO のような、基本ライブラリの XMP への移植をスムーズに行えるよう配慮した。また、SC10 に引き続き、国際会議 SC11 における HPC Challenge Class2 において Honorable Mention を受賞した。

XMP version 1.0 の仕様及びプロトタイプコンパイラについては、それぞれ以下の URL において公開されている。

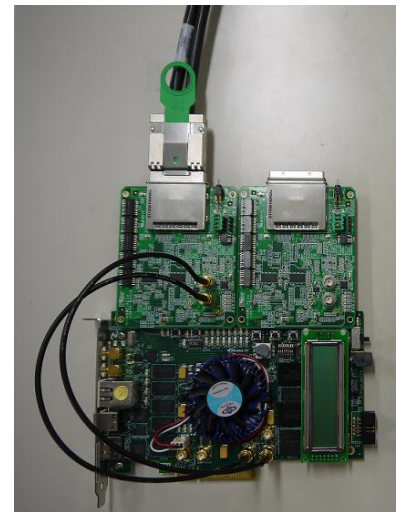
XMP version 1.0 仕様 : <http://www.xcalablemp.org/spec/xmp-spec-1.0.pdf>

C 言語プロトタイプコンパイラ : <http://www.xcalablemp.org/download.html>

【HA-PACS/TCA の研究開発】(朴, 児玉, 塙)

文部科学省特別経費「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」(H23~H25 年度の 3 年間)において、密結合演算加速装置 (Tightly Coupled Accelerators: TCA) を提案し、FPGA に基づくハードウェアプロトタイプの実装を行った。汎用 I/O バスである PCI Express(PCIe)を組み込み用途等だけでなく、アクセラレータ間/CPU とアクセラレータ間/アクセラレータ同士等の様々な結合に用いることを提案し、実証実験によりこれを検証する。今年度は HA-PACS のベースクラスタの構築と試験運用と並行し、FPGA プロトタイプによる PCIe 通信の評価と FPGA による GPU 通信支援の検討を行い、標準的な PC サーバに実装可能な TCA ボードを実装した。

これまでに JST-CREST「実用化を目指した組み込みシステム用ディペンダブル・オペレーティングシステム」研究領域「省電力でディペンダブルな組み込み並列システム向け 計算プラットフォーム」研究課題において開発した、PEACH チップで得られた知見を活かして、TCA に用いるルータチップ PEACH2 チップについて検討した。PEACH2 を開発するに当たって、(1) PCIe Gen2 x8 を 4 ポート備えること、(2)ハードワイヤード制御によりレイテンシを削減すること、(3)DMA コントローラを高機能化して高い転送性能を実現すること、を目標とした。開発のベースとして、PCIe Gen2 x8 4 ポートのハード IP を内蔵した FPGA チップ(Altera 社 Stratix IV GX)を採用した。



PEACH2 ボード step1 実装

今年度の開発では、Step 1 としてターゲットとなる FPGA が搭載された市販評価ボードに、PCIe ケーブルを接続するための拡張ボードを作成し、FPGA を用いた PCIe 通信機構の実証実験を行い、2 枚のボード間を PCIe ケーブルで接続して Gen2 x8 にてリンクアップすることを確認した。さらに、ホストと FPGA 間で DMA の性能を測定し、3GB/s 以上の性能を得た。続いて、Step2 として、実システムを想定したプロトタイプボードを設計・実装した。このボードには、ホストとの接続用に PCIe Gen2 x8 エッジ、他ノードとの接続用に x8 ケーブルポート 2 個、サブボード上に x16 ポート 1 個が実装され、DDR3 メモリやデバッグ用の周辺回路が実装されている。同時に、FPGA の論理設計を行い、4 ポート間でのルーティング機構を実装した。論理設計シミュレーションにより、1 パケットが CPU から PEACH2 を経由して隣接 PEACH2 に届くまでに 430ns 程度の遅延であることが分かった。



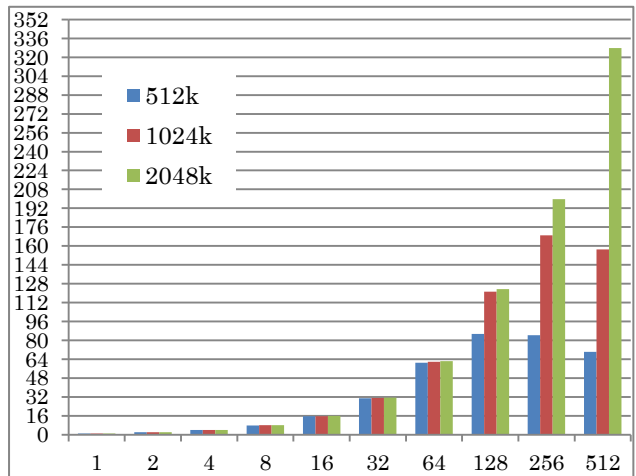
PEACH2 step2 ボード実装

【超並列 GPU コンピューティング技術に関する研究】(佐藤，朴)

戦略的国際科学技術協力推進事業（日仏共同研究）「ポストペタスケールコンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」において、超並列 GPU クラスタにおける並列プログラミング環境に関する研究を行っている。XMP 言語のアクセラレータ

拡張版である XMP-dev のプロトタイプ実装を行い、小規模 GPU クラスタでの性能評価を経て、HA-PACS ベースクラスタにも実装、128 ノード 512GPU までのスケーラビリティを確認した。

また、フランス INRIA との共同研究において、INRIA において開発中の CPU/GPU 協調動作による負荷分散システムである StarPU を XMP-dev コンパイラに連携させ、XMP-dev によって記述された並列プログラムを、動的負荷分散処理によって各ノードの CPU と GPU を全て計算リソースとして利用し、ハードウェアの利用率を最大化するハイブリッド協調プログラミングシステム XMP-dev/StarPU のプロトタイプ開発を行った。



XMP-dev における N 体問題プログラムの
HA-PACS における並列 GPU 実行評価

【ディペンダブルシステムのためのテストツール】(佐藤, 埴)

(1) クラウドを用いたディペンダブルな並列分散システムのためのテスト支援環境 D-Cloud

これまで、JST-CREST「実用化を目指した組込みシステム用ディペンダブル・オペレーティングシステム」研究領域において、我々は並列分散テスト環境 D-Cloud を開発してきた。高い信頼性確保のためには異なる入力による網羅的なテスト実行やハードウェア故障に対する耐故障性のテストなど様々なテストが必要で、それらを実行するには非常に時間と手間がかかる。D-Cloud ではフォルトインジェクション可能な仮想マシンを用いて仮想デバイスレベルでの故障についてのテストが可能であるだけでなく、仮想マシンをクラウドとして管理することにより、多くの計算資源を柔軟に利用することができ、多くのケースについてのテスト作業を自動化することができる環境を提供する。同時に、東大石川チームと共同で、各種の定量的なディペンダビリティ指標のシステムティックな計測を支援することを目的に、ディペンダビリティ計測ツール DS-Bench を開発してきた。ハードウェア異常、ソフトウェアバグ、過負荷、人的ミスといった様々な異常を系統立てて扱うことによって、大規模なシステムテストを実現し、多くのテストパターンを用いた複雑なテストを加速することが求められる。

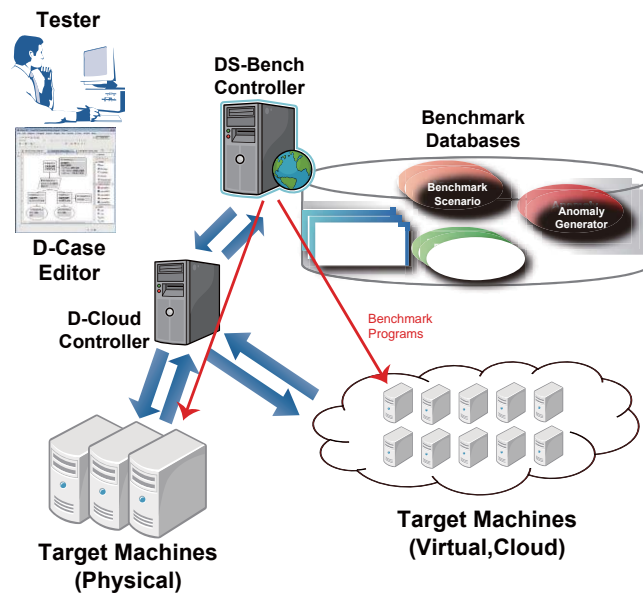
今年度は、我々の開発した D-Cloud を、DS-Bench のシステムテスト環境として統合を行った。仮想マシン管理に使用するクラウド管理ソフトウェアを業界標準の OpenStack をベースに変更した。さらに、仮想マシンに加えて物理マシンの管理機能を追加した。また、DS-Bench から与えられるシナリオに基づいてマシン群やフォルトイ

ンジェクションなどの制御をするよう変更を加えた。これにより、物理マシン、仮想マシンを自由に組み合わせて自在なベンチマークテストが可能になった。

(2) SpecC によるデバイスモデルを用いたシミュレータと仮想マシンの統合

フォルトインジェクション機能を持つ仮想マシン FaultVM として、QEMU をベースにメモリ、ハードディスク、ネットワーク等のインジェクション機能を実装してきた。これまで用いていた仮想マシン QEMU を拡張して、独自デバイスを持つ組み込みシステム全体をシミュレーションし、フォルトインジェクション機能を組み込む方法について検討し、SpecC システム記述言語で記述されたデバイスモデルを利用してソフトウェアまで含めたシミュレーションを可能にする FaultVM-SpecC の開発を行ってきた。

今年度は、XML 記述によるシミュレータ生成の自動化を検討し、実装を行った。XML によりコンフィグレーションファイルを記述し、Perl によるコンバータで自動的に FaultVM のためのグルー・コードを生成することにより、既存の FaultVM と SpecC シミュレータとを容易に結合できるようになった。



DS-Bench 統合後のイメージ

【大規模広域分散ファイルシステム及びグリッド／クラウド技術に関する研究】(建部)

オープンソースで研究開発を進めている Gfarm ファイルシステムの大規模広域環境における性能評価を行った。MDS の冗長化による Gfarm ファイルシステムの信頼性向上, MapReduce 処理系における応用, ワークフローエンジンの実装と性能評価等を行った。また、QCD データベースである JLDG プロジェクトにおける運用に続き、H24 年度から開始される HPCI の東西両拠点での広域分散ファイルサービスに Gfarm が利用されるため、その予備実装と評価を行った。

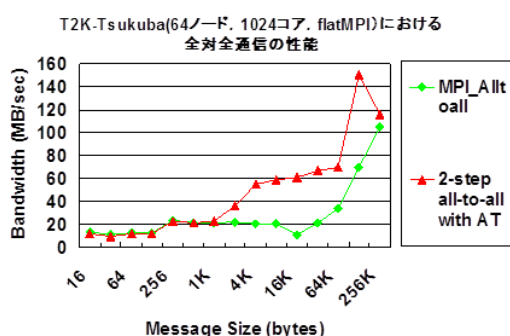
【高性能並列数値計算に関する研究】

(1) 並列高速フーリエ変換 (FFT) の自動チューニング手法に関する研究 (高橋)

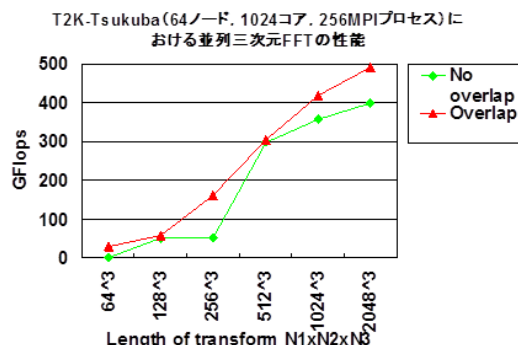
科学技術計算で広く用いられている並列高速フーリエ変換 (FFT) の性能を改善するために、高速化手法に関する研究を行った。並列 FFT において実行時間の多くを占める全対全通信に着目し、MPI のコミュニケータを二次元方向に分割して全対全通信を行う 2-step all-to-all アルゴリズムを提案すると共に、各次元方向のコミュニケータのサイズを自動チューニングすることで、全対全通信の性能が改善されることが分かった。

また、並列三次元 FFT において、二次元分割により通信時間を削減すると共に、演算と通信をオーバーラップさせることで、従来の実装に比べてさらに性能を改善し、次世代ナノ統合アプリケーションである「3D-RISM」に応用した。

さらに、並列一次元 FFT において、データサイズが $N=2^{40}$ を超える場合に有効な再帰 six-step FFT を提案すると共に、「京」コンピュータ向けの最適化を行った。提案した再帰 six-step FFT に基づく並列一次元 FFT プログラムを「京」コンピュータの 18,432 ノードで実行した結果、HPC チャレンジベンチマークの 2011 年「HPC チャレンジ賞」の「G-FFT」部門において、34.7 TFlops の性能を達成し、Class 1 Award において第 1 位の獲得に貢献した (理化学研究所との共同研究)。



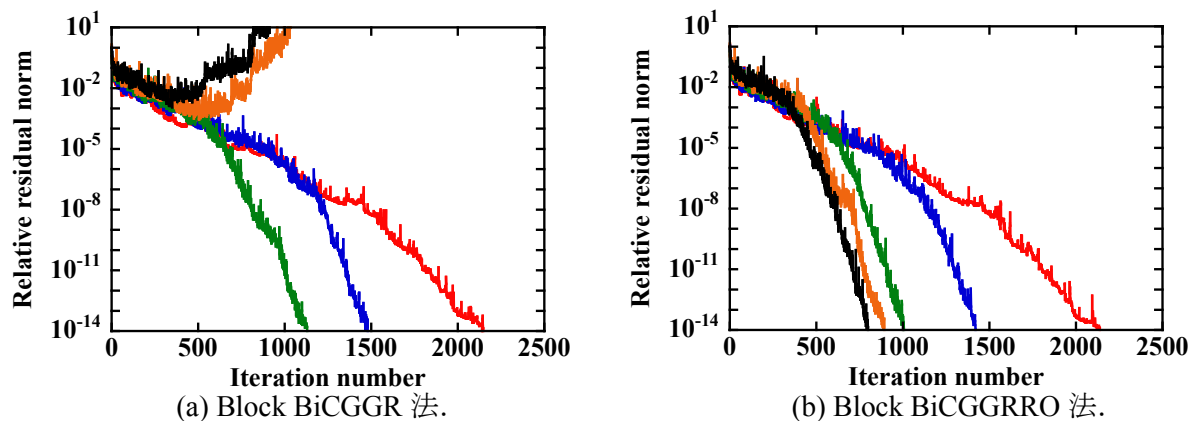
T2K-Tsukuba における全対全通信の性能



T2K-Tsukuba における並列三次元 FFT の性能

(2) Block Krylov 部分空間反復法に関する研究 (多田野)

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を高速・高精度で解くための Block Krylov 部分空間反復法の研究を行った。従来法である Block BiCGGR 法では、反復過程で発生する数値的不安定性が欠点となっていた。数値的不安定性の解析を行い、残差行列の直交化により不安定性を解消する Block BiCGGRRO 法を開発した。格子 QCD 計算で現れる連立一次方程式 (行列サイズ: 1,572,864) に対して Block BiCGGR 法を適用すると、右辺ベクトル数 L が 8, 12 の場合は数値的不安定性の影響で残差が発散したが、Block BiCGGRRO 法では全ての L について残差が収束条件を満足した。また、Block BiCGGRRO 法によって高精度近似解を生成できることが確認された。



右辺ベクトル数 L の変化に対する相対残差の変化. 但し, ■ : $L=1$, ■ : $L=2$, ■ : $L=4$, ■ : $L=8$, ■ : $L=12$.

【エネルギー利用最適化に関する研究】(佐藤, 児玉)

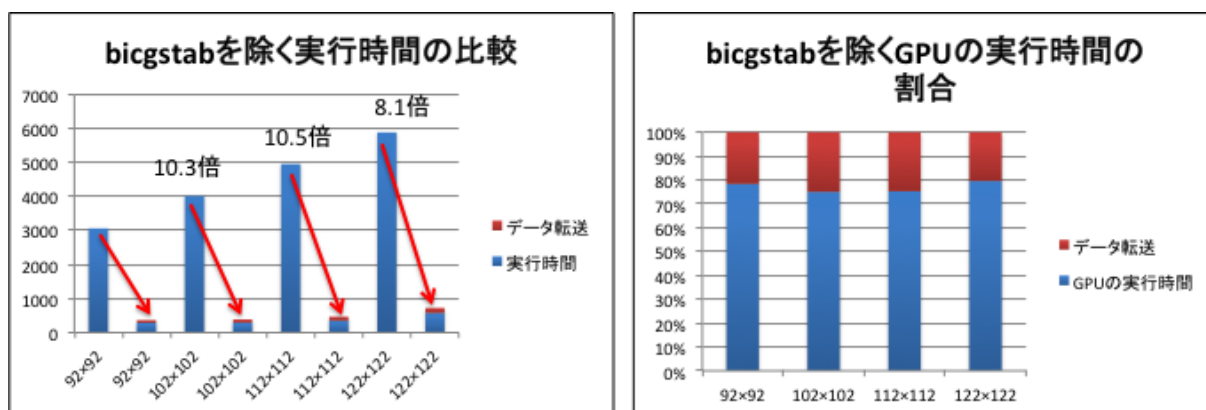
NEDO グリーン IT プロジェクト「エネルギー利用最適化データセンタ基盤技術の研究開発／データセンタのモデル設計と総合評価」(平成 20 年度から平成 24 年度)において, サーバシステムの評価指標に関する研究を行っている. 本年度は, ソフトウェアにより省エネ運用を行った場合のユーザへの影響評価を重点的に行った. エネルギー消費量を削減するために, サーバシステムの変更可能なパラメータを制御して運用する場合, 消費電力量を下げることはできるがサーバの性能も低下してしまう場合がある. このような省エネ運用の際の効果と影響について, ユーザと事業者との間の契約事項をここでは Green SLA と呼ぶ. Green SLA を策定するためには, 省エネ運用で選択可能なシステムパラメータに対して, その消費電力量の削減量と性能への影響を定量的に把握しておくことが必要となる. しかし, このシステムパラメータは多岐にわたるため, それらをリストアップするとともに, できるだけ単一の指標で評価できるように電力あたりの性能 (Performance Per Watt, PPW) の観点から評価結果をまとめた.

【LES 気象コードの並列 GPU 化に関する研究】(朴, 埴)

計算科学研究センター地球環境研究部門の日下准教授らのチームとの共同研究により都市規模の気象に関する Large Eddy Simulation (LES)コードの並列 GPU 化を進めた. 同研究部門では地域レベルの気象シミュレーションとして, 都市モデルを対象とした LES 計算の研究を進めており, これまでは T2K-Tsukuba 等の並列処理システムにおける MPI 並列プログラムを開発してきた. 今年度より, 同部門のチームと共同で, HA-PACS に代表される GPU クラスタ向けにコードを開発し, 大規模 GPU クラスタにおける LES 計算を行い, 都市モデルの正確な気象シミュレーションの実現を目指す.

今年度の研究では, 対象コードの力学系シミュレーションの基本部分を全て GPU 化し, 高速化を行った. コード内の分割された関数群の間でデータのやり取りが行われる

が、これを直接 GPU 関数にマップすると大量のデータ入出力が発生し、高速化の妨げとなる。これを防ぐため、基本的な全データを GPU 内に留め、細かい関数群をまとめた粒度の粗い GPU カーネル関数として実装し直すことにより、オーバーヘッドの小さな並列 GPU コードにまとめた。また、力学系におけるステンスル計算の並列化における境界データのノード間交換のオーバーヘッドを最小化するため、GPU による計算と境界部分の MPI 通信をオーバーラップさせ、効率化を図った。これらの結果、時間発展ループに関し、BiCGStab 処理を除く全ての処理を GPU 化することに成功し、最大で 10.5 倍の速度向上を図ることができた。



LES 気象コードの問題サイズと GPU 化による速度向上（左：BiCGSTAB ルーチン以外の実行時間の比較、右：GPU 実行における CPU/GPU 間データ転送オーバーヘッド）

3. 研究業績

(1) 研究論文

1. 多田野寛人, 櫻井鉄也. 複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法. 応用数理, Vol. 21, No. 4, pp. 36—48, 2011.
2. Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai, and H. Tadano. Modified Block BiCGSTAB for Lattice QCD. Comput. Phys. Comm., Vol. 183, pp. 34—37, 2012.
3. 木村浩希, 建部修見, MPI-IO/Gfarm: 分散ファイルシステムGfarmのためのMPI-IOの実装と評価, 情報処理学会論文誌, No.52, Vol.12, pp.3239-3250, 2011.
4. 大辻弘貴, 建部修見, アクセスパターンと回線遅延を考慮した遠隔ファイルアクセスの最適化, 論文誌コンピューティングシステム(ACS), 情報処理学会, No.4, Vol.4, pp.122-134, 2011.
5. Mark G. Beckett, Paul Coddington, Bálint Joó, Chris M. Maynard, Dirk Pleiter, Osamu Tatebe, Tomoteru Yoshie, Building the International Lattice Data Grid, Computer Physics Communications, Elsevier, Vol.182, Issue 6, pp.1208-1214, doi: 10.1016/j.cpc.2011.01.027, 2011

6. Yuetsu Kodama, Satoshi Itoh, Toshiyuki Shimizu, Satoshi Sekiguchi, Hiroshi Nakamura and Naohiko Mori, “Imbalance of CPU temperatures in a blade system and its impact for power consumption of fans”, CLUSTER COMPUTING, Springer, DOI: 10.1007/s10586-011-0174-7, published online, 2011.9.5.

(2)学会発表

(A)招待講演

1. M. Sato, “The K Computer Project and Research on Parallel Programming Languages”, PGAS2011 (Fifth Conference on Partitioned Global Address Space Programming Models), 2011.
2. T. Boku, "Accelerated Computing: Promised Way for Power-Aware High Performance Computing", Dasan Conference, Jeju Island, 2011.
3. T. Boku, "The K Computer and Japan's HPC Activity", Korea Supercomputing Conference, Seoul, 2011.
4. 多田野寛人, “超大規模並列環境における大規模疎行列に対する固有値解法と線形計算技術の開発”, HPCS2012 (2012 年ハイパフォーマンスコンピューティングと性能評価に関するシンポジウム)
5. 朴泰祐, “超並列演算加速クラスター HA-PACS が拓く計算科学”, つくば WAN シンポジウム 2011, 2011.

(B)その他の学会発表

1. T. Hanawa, T. Boku, S. Miura, M. Sato, K. Arimoto, “PEARL and PEACH: A Novel PCI Express Direct Link and Its Implementation,” HPPAC 2011.
2. S. Otani, H. Kondo, K. Arimoto, T. Hanawa, S. Miura, H. Kaneko, T. Boku, M. Sato, “PEACH: a Multicore Communication SoC with PCI Express” , ASPLOS2012 (Poster, to be published)
3. T. Hanawa, T. Boku, S. Miura, M. Sato, K. Arimoto, “PEACH: A Communication SoC for PCI Express Direct Link,” COOL Chips XIV (Poster, Best Feature Award)
4. Takatoshi Nakayama and Daisuke Takahashi: Implementation of Multiple-Precision Floating-Point Arithmetic Library for GPU Computing, Proc. 23rd IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Systems (PDCS 2011), pp. 343-349 (2011).
5. Yuji Kubota and Daisuke Takahashi: Optimization of Sparse Matrix-Vector Multiplication by Auto Selecting Storage Schemes on GPU, Proc. 11th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2011), Part II, Lecture Notes in Computer Science, No. 6783, pp. 547-561,

Springer-Verlag (2011).

6. Yukihiro Hasegawa, Jun-Ichi Iwata, Miwako Tsuji, Daisuke Takahashi, Atsushi Oshiyama, Kazuo Minami, Taisuke Boku, Fumiyoshi Shoji, Atsuya Uno, Motoyoshi Kurokawa, Hikaru Inoue, Ikuo Miyoshi and Mitsuo Yokokawa: First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer, Proc. 2011 ACM/IEEE Conference on High Performance Computing Networking, Storage and Analysis (SC'11) (2011).
7. S. Mikami, K. Ohta, O. Tatebe, Using the Gfarm File System as a POSIX compatible storage platform for Hadoop MapReduce applications, Proceedings of 12th IEEE/ACM International Conference on Grid Computing (Grid), 2011
8. K. Kobayashi, S. Mikami, H. Kimura, O. Tatebe, The Gfarm File System on Compute Clouds, Proceedings of 1st International Workshop on Data Intensive Computing in the Clouds (DataCloud), 2011
9. H. Kimura, O. Tatebe, MPI-I/O/Gfarm: An Optimized Implementation of MPI-I/O for the Gfarm File System, IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid), Poster presentation, 2011
10. 大辻弘貴, 建部修見, アクセスパターンと回線遅延を考慮した遠隔ファイルアクセスの最適化, SACSIS2011 論文集, pp.11-19, 2011
11. 三上俊輔, 太田一樹, 建部修見, POSIX 準拠の広域分散ファイルシステム Gfarm 上での Hadoop MapReduce アプリケーション, SACSIS2011 論文集, pp.181-188, 2011
12. J. Tucc, O. Tatebe, The Gfarm-iPhone Bridge: Seamless, Proceedings of SACSIS 2011, poster, pp.248-249, 2011.
13. 佐藤佳州, 高橋大介: 特徴の生成を組み合わせた機械学習, 第 16 回ゲームプログラミングワークショップ, pp. 135-142 (2011).
14. 中山空星, 高橋大介: GPU 上における多倍長精度浮動小数点演算の実装, 情報処理学会研究報告, 2011-ARC-197, 2011-HPC-132, No. 25 (2011).
15. 椋木大地, 高橋大介: GPU による 3 倍精度浮動小数点演算の検討, 情報処理学会研究報告, 2011-ARC-197, 2011-HPC-132, No. 23 (2011).
16. 朴泰祐, 佐藤三久, 塙敏博, 児玉祐悦, 高橋大介, 建部修見, 多田野寛人, 藏増嘉伸, 吉川耕司, 庄司光男: 演算加速装置に基づく超並列クラスタ HA-PACS による大規模計算科学, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130, No. 21 (2011).
17. 斎藤華, 朴泰祐, 金谷和至, 塙敏博, 佐藤三久, "スクリプト言語 Xcrypt による格子 QCD シミュレーションのパラメータサーチ自動化", HPCS2012.
18. 二星義裕, 朴泰祐, 池田亮作, 日下博幸, "高解像度 LES 計算の GPU による計算加速", HPCS2012 (Poster).
19. 二星義裕, 池田亮作, 朴泰祐, 日下博幸, "高解像度 LES 気象モデル計算の GPU 化",

- 2011-HPC-131.
20. 金子紘也, 埴敏博, 三浦信一, 朴泰祐, 佐藤三久, “PCI Express を用いた通信リンク PEARL におけるネットワーク管理機構”, 2011-ARC-196.
 21. 朴泰祐, 佐藤三久, 埴敏博, 児玉祐悦, 高橋大介, 建部修見, 多田野寛人, 藏増嘉伸, 吉川耕司, 庄司光男, “演算加速装置に基づく超並列クラスタ HA-PACS による大規模計算科学”, 2011-HPC-130.
 22. 中尾昌広, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久, “PGAS 言語 XcalableMP と Unified Parallel C の性能比較”, 2011-HPC-130.
 23. Tran Minh Tuan, 李珍泌, 小田嶋哲哉, 朴泰祐, 佐藤三久, “PGAS 言語 XcalableMP の multi-node GPU 向け拡張仕様の実装と評価”, 2011-HPC-130.
 24. 斎藤華, 朴泰祐, 金谷和至, 埴敏博, 佐藤三久, “スクリプト言語 Xcrypt による格子 QCD シミュレーションの最適化”, 2011-HPC-130.
 25. 小田嶋哲哉, チェントウァンミン, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久, “並列言語 XcalableMP の GPU 向け拡張”, 2011-HPC-129.
 26. 多田野寛人, “高精度近似解を生成する Block Krylov 部分空間反復法とその安定化”, 第 1 回計算力学シンポジウム, 日本学術会議, 2011 年 11 月.
 27. S. Mikami, K. Ohta, O. Tatebe, Hadoop MapReduce on the Gfarm file system, Korea-Japan e-Science and Cloud Symposium, 2011
 28. M. Tanaka, O. Tatebe, Challenge of Pwrake, a workflow system for post-petascale data-intensive sciences, PRAGMA 21 Workshop, poster, 2011
 29. 大辻弘貴, 建部修見, Non-blocking RPC を用いた遠隔ファイルアクセスの実装と性能評価, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-132(16), 5 pages
 30. 實本英之, 建部修見, 佐藤仁, 石川裕, 広域分散環境を提供する HPCI システムソフトウェア基盤の設計概要と共有ストレージ構築, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(67), 6 pages
 31. 田中昌宏, 建部修見, ワークフロー実行中のデータ移動を最小化するタスク配置方式, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(61), 8 pages
 32. 平賀弘平, 建部修見, 分散ファイルシステムにおけるメタデータサーバの冗長化手法の検討, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(37), 7 pages
 33. 石津晴崇, 永岡孝, 大西健司, 高杉英利, 建部修見, 耐障害性を高めた分散ストレージシステムの開発とその評価, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(36), 8 pages
 34. 永岡孝, 石津晴崇, 大西健司, 高杉英利, 建部修見, クラウドにおける大規模ストレージシステムの必要性とその検討～Gfarm v2.4 を拡張した EB 級システム～, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(34), 8 pages
 35. 木村浩希, 建部修見, MPI-IO/Gfarm におけるデータ配置を考慮したプロセススケジューリングの検討, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(33), 7 pages

36. 大辻弘貴, 建部修見, Non-blocking RPC を用いた遠隔ファイルアクセスの最適化, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(30), 7 pages
37. 朴泰祐, 佐藤三久, 塙敏博, 児玉祐悦, 高橋大介, 建部修見, 多田野寛人, 藏増嘉伸, 吉川耕司, 庄司光男, 演算加速装置に基づく超並列クラスタ HA-PACS による大規模計算科学, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(21), 7 pages
38. 大西健太, 建部修見, 西谷明彦, 大岸智彦, Ceph のメタデータサーバの冗長性の調査, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-129(8), 7 pages
39. 大岸智彦, 西谷明彦, 大辻弘貴, 建部修見, 分散ファイルシステムの性能監視とボトルネック特定, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-129(5), 8 pages
40. J. Tucci, O. Tatebe, StableSearch: A Searchable File Content Metadata System for the Gfarm File System, IPSJ SIGHPC Report, 2011-HPC-129(7), 6 pages

4. 連携・国際活動・社会貢献、その他

1. 戦略的国際科学技術協力推進事業 (日仏共同研究) 「ポストペタスケールコンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」 (佐藤)
2. 多国間国際研究協力事業 G8 Research Councils Initiative “Nuclear Fusion Simulation for Exascale” 日本代表 PI (朴)
3. 多国間国際研究協力事業 G8 Research Councils Initiative “Exascale Climate Simulation” 日本代表 PI (佐藤)

VII. 計算情報学研究部門

VII-1. データ基盤分野

1. メンバ

教授 北川博之
准教授 天笠俊之
講師 川島英之

2. 概要

e サイエンスにおいて、大規模データの管理や活用は極めて重要な課題となっている。計算情報学研究部門データ基盤分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当している。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統合的に扱うための XML 関連技術の研究を継続して行った。また、センター内の地球環境研究部門や素粒子物理研究部門や産業技術総合研究所と連携して、計算科学の各分野における応用的な研究を推進した。

3. 研究成果

2011 年度の主要な研究成果について説明する。

【1】情報統合基盤技術

(主な研究費: 科研費基盤研究 (A), 科研費特定領域研究, 科研費若手研究 (B))
分散した異種情報源を統合的に扱うための基盤技術・システム・応用の研究開発を行った。特に、従来型のデータベースや Web 等のみではなく、センサ、位置情報源等の連続的に情報を提供するストリーム情報源をも対象とすることが出来るストリーム処理基盤システムにおけるデータ処理技術を中心に研究開発を行った。

(1) 高信頼化ストリーム処理 (北川, 川島) [P22]

センサデータなどのストリームデータに対する問合せ要求が増大し、それらを実現するストリーム処理システムが研究開発されている。地理的に離れた情報源の統合や負荷分散を実現するために、ストリーム処理システムを分散配置した上で協調動作させる分散ストリーム処理環境が注目されている。分散環境では、中継ノードが停止することでシステム全体が停止してしまうという問題がある。この問題に対して、我々は分散環境において高信頼化を実現する Semi-Active Standby 方式を提案してきた。これは、各分散ノード間の通信にバッチ処理を導入することで、既存手法である Active Standby 方式, Upstream

Backup 方式を一般化し、リカバリ時間とバンド幅オーバーヘッドを適用環境に合わせて調節することを可能とする。本研究では Semi-Active Standby 方式における ack パラメタ調整を自動化する方式について検討を行った。そして様々な設定において評価実験を行い、本方式の動作特性を検証した。

(2) ストリームデータの永続化手法 (川島, 北川) [C11]

本研究では各種デバイスから自律的、かつ継続的に発信されるストリームデータを永続化する手法を検討した。永続化とは、停止故障が生じてもデータを失わないデバイスである永続的デバイスへデータを書き込むことによって、ストリームデータを永続的に保存する技術である。高頻度で配信されるストリームデータを永続化するには、ディスクへの書き込み処理がボトルネックになる。この問題を解決するための永続化手法を検討した。第一の提案は、問合せ処理中に出現する複数の選択演算子を併合することである。これにより永続化の対象となるデータ量を削減することが可能になる。第二の提案は、問合せ処理木の途中で、ストリームデータを中間領域と呼ばれるファイルへ一時的にシーケンシャルに書き込む事である。処理木とは、問合せの代数的表現であり、ストリーム処理システム内部でデータ処理を記述するために使用される構造である。この提案によりランダムアクセスを無くし、書き込み性能を向上させる。ただし中間領域のデータはユーザからアクセス不能である為、中間領域のデータをユーザからアクセス可能にするため、それらを遅延して読み出し、データ領域へ書き込むことが必要になる。第三の提案は、中間領域からの読み出しが書き込みに干渉しないように、データ領域への書き込み処理を制御することである。提案手法によりストリームデータの永続化が効率化されることを実験的に示した。

(3) メディアストリームとタプルストリームの統合的処理 (川島, 北川) [P20]

これまでストリームデータを処理するための枠組みとして、ストリーム処理システム (Stream Processing System) という枠組みが研究、開発されてきた。しかし、既存のストリーム処理システムはタプルストリームの処理を前提としているために、画像、動画のようなメディアストリームの処理を行うことが難しい。そこで本研究ではメディアストリームを管理するメディアサーバおよびメディアデータ要求インタフェースを開発した。なお、メディアストリームの情報源としては Kinect を対象とした。本研究の貢献を下記に示す。

✓ メディアサーバ

メディアサーバはメディアストリームを受信すると、それを保持する。メモリが不足した場合にはデータを一部の二次記憶へ移動する。メディアサーバはデータ配信要求を受け取ると、該当するメディアストリームを配信する。メディアサーバは複数のクライアントからの同時接続を許可する。

✓ メディア要求インタフェース

メディア要求インタフェースは、あるタプルストリーム処理系からのタプルを受信した時に、メディアストリームを取得するインタフェースを提供する。ある情報源からのタプルが到着した時に処理木を動作させる仕組みについては、すでに StreamSpinner において MASTER 節が提案されている。しかし、あるタプルストリーム処理系からのタプルを受信したときに、別のストリーム処理系からのデータを受信するスキームは我々が知る限り存在しない。本研究の提案と MASTER 節の違いは処理レベルの高さにある。MASTER 節は 1 つの処理木におけるイベント駆動スキームであるが、本研究は異なるストリーム処理系におけるイベント駆動スキームである点異なる。

✓ Kinect データ取得システム

本研究で扱うメディアデータ情報源として扱う Kinect は様々な種類のデータを取得可能である。Kinect をサーバ化した研究には KineX[9] が存在する。しかし KineX は Windows でしか動作しない。そこで本研究では Linux 環境で動作する Kinect データサーバである Konnect を実装した。

【2】データマイニング・知識発見技術

(主な研究費：科研費基盤研究 (A) , 科研費若手研究 (B))

多様な情報源に対する外れ値検出, ソーシャルネットワーク分析, 種々のデータマイニング・知識発見技術の研究開発を進めた。以下では、主なものについて述べる。

(1) マイクロブログの分析 (天竺, 北川) [J5, C2, P11]

Twitter におけるメッセージはツイートと呼ばれ、ツイートを投稿することをポストという。Twitter ユーザはツイートに外部の Web ページの URL を含め、他のユーザと共有することが多い。これは、自らが投稿したブログなどの外部ページの URL をツイートに含めることで他のユーザに知らせたり、閲覧して面白い、参考になると感じた Web ページを他のユーザと共有したりすることによる。予備調査によると、ポストされたツイートのうち約 14 % は URL を含んでいることが明らかになった。共有された Web ページは、生成されて間もないページであることが多いと報告されている。本研究では、生成されて間もない Web ページを鮮度の高いページと呼ぶ。したがって、Twitter からは鮮度の高い Web ページを得ることができると考えられる。しかし、Twitter 上で共有される Web ページは膨大であり、そのトピックも多岐にわたっているため、その中から自らが得たいものを得るのは困難である。そこで本研究では、膨大な Web ページの中から重要なもののみをユーザの興味に合わせて推薦する手法を提案した。詳細は下記に述べる。

まず、ある Web ページがどのような専門性を持つユーザに共有されたかによって、その Web ページの重要度を推定した。ユーザの専門性とは、ユーザが主にどのようなトピックに関しての情報を発信するかという属性である。例えば、スポーツに関する情報をよく発信する多くのユーザがある Web ページを共有していれば、その Web ページは重要であり、かつスポーツに関するものであると考えられる。次に、ユーザの興味を推定し、その興味に見合った Web ページを推薦した。ユーザの興味は、そのユーザがフォローするユーザ群の専門性によって推定した。例えば、スポーツに関して専門性の高いユーザを多くフォローするユーザは、スポーツに興味を持っていると考えられる。実験により提案手法の有用性を確認した。

(2) 再生リストを利用した Web 動画クラスタリング (北川) [C10, P7]

近年複数の動画共有サイトで普及している機能として、「再生リスト」がある。再生リストはユーザが任意に作ることの出来る動画のリストで、ユーザは再生リストに登録されている動画に素早くアクセスする事ができる。一人のユーザが複数の再生リストを作成可能なので、音楽動画を集めた再生リストやスポーツに関する動画を集めた再生リストなど、再生リストを利用して頻繁にアクセスする動画をカテゴライズすることが出来る。その場合、同一再生リストに含まれる動画間にはなんらかの類似性があると考えられる。我々はこの「再生リスト」に着目し、再生リスト情報に基づいて動画間の類似度計算を行う。そして画像や音声、テキスト情報に依存しない高精度な動画クラスタリング手法を提案する。本研究では最初に、予備実験によって同一再生リストに含まれる動画間に類似性があるかどうかを確認した。次に再生リスト情報に基づく動画クラスタリング手法を提案した。実験によって提案手法の効果を定量的に示した。

(3) 距離索引を用いた逆最遠傍問合せに関する効率的な検索手法 (北川) [C9, P3]

近年、利用者の多様な情報要求に対応するため、多次元データに対するさまざまな問合せ処理が提案されている。k 近傍問合せ (k-Nearest Neighbor Query)、範囲問合せ (Range Query)、逆最近傍問合せ (Reverse Nearest Neighbor Query) などはその例である。しかし、問合せ点から遠傍に存在するデータの検索、特に、逆最遠傍 (Reverse Furthest Neighbors; RFN) の問合せ処理あまり注目されていなかった。

データセット O 及びクエリ q を与えた際に、逆最遠傍検索は、 O の中から q を最遠傍とする全てのオブジェクトを求める問題である。本研究では、逆最遠傍 (Reverse Furthest Neighbors, RFN) 探索問題に対して、R 木構造を基に特化した空間索引と、これを用いた検索アルゴリズムを提案した。先行研究では、

従来手法の高い計算量を大幅に削減でき、任意位置のクエリ q に適用可能な検索手法を提案したが、効率的に十分ではなく、多次元データにも適応しにくいという問題があった。本研究では、ピボットセットを選出して、同一ピボットを最遠傍とするデータをまとめて R 木に格納し、最遠傍距離を埋め込めるように特化した空間索引、およびこの空間索引を用いた RFN 検索アルゴリズムを提案した。さらに、多次元への拡張を検討し、合成データと実データを用いて提案手法の効率とスケーラビリティを検証した。

（４）GPU によるデータマイニング処理の高性能化（天笠，北川）[C1, C3, P2]

GPU は数百以上の SIMD (Single Instruction, Multiple Data) コアを持つため、CPU と比較して、極めて並列度の高いデータ処理を行なうことができる。この SIMD コアは、一つの命令を複数のデータに対して、並列に実行していく処理に適したアーキテクチャとなっている。そのため、GPU はその性質上、複雑な条件分岐を含む処理には向いていない。そこで、GPGPU を用いる際には、GPU に適したアルゴリズムの開発が重要な課題の一つとなる。本研究では、不確実データベースからの頻出アイテム集合マイニングの高速化のために、GPGPU を利用した手法を提案した。提案手法は、Sun らの提案した pApriori アルゴリズムを元に、GPU 上での並列実行により処理の高速化を図った。さらに、pApriori アルゴリズムとの比較実験により、提案手法の性能を評価した。

【３】XML・Web プログラミング

（主な研究費：科研費基盤研究（A）、科研費若手研究（B））

Web 上の標準データフォーマットとして利用されている XML (Extensible Markup Language)、メタデータ記述の枠組みである RDF (Resource Description Framework) に関する研究を行うとともに、オープンな環境でのデータ利用に書かせないデータプライバシーの研究を行った。

（１）XML データに対するファセット検索（天笠，北川）[C8, P4]

グラフは複雑なデータを表現可能なデータ構造である。一方で、ファセット探索は探索的な検索を行うための有用な手法として広く利用されている。グラフデータに対してファセット探索を行う際には、検索対象（ノードや部分グラフ）とプロパティ（特徴を表す属性）が予め定義されている必要がある。しかしながら、グラフデータ中の検索対象や検索対象のプロパティを予め指定することは容易ではない。これに対して本研究では、グラフデータに対するファセット探索を行うための検索対象の抽出方法について議論する。本研究ではグラフ中の頻出パターンに着目することで検索対象の抽出を行う枠組みを提案する。また、本研究では抽出した検索対象やファセットを効率的に格納する方法についても議論した。

(2) 省電力を考慮した XML ストリーム処理 (天笠, 北川) [P10]

XML は多様なデータを柔軟に表現できるため、多くの分野でデータの記述、交換のために利用されている。Web サービスやセンサネットワークにおいては、データの送受信のために XML フォーマットを利用することが多い。このとき、XML データは、情報源から継続して送信される XML ストリームとみなすことができ、XML ストリームに対する問合せやフィルタリング処理に関する研究が数多く行なわれてきた。一方、地球温暖化や震災による電力不足をきっかけとして、情報システムにおいて電力消費の問題は特に注目されている。前述の XML ストリーム処理系は、常時オンで処理を続けるため、電力削減の効果が期待できる。

このため、本研究では XML ストリーム処理における省電力を考慮した問合せ処理方式を検討した。本研究の着眼点は、1) XML ストリームにおいて、問合せ結果として必要な部分は多くの場合ごく一部であること、2) XML ストリーム処理では、文字列の字句解析、構文解析に多くの計算量が割かれていることである。このため、実際の問合せ結果として必要でない部分については、構文解析等の処理を省くことで、省電力化を達成した。具体的には、XML のパーサと問合せ処理部を拡張し、相互に連携をする機構を開発することによって、問合せ結果になりえない XML データについては、構文解析の処理を省くことを可能にした。この成果が評価され、DEIM フォーラム 2012 において、学生奨励賞を受賞した。

(3) Lined Data のスキーマ情報推定 (天笠, 北川) [P6]

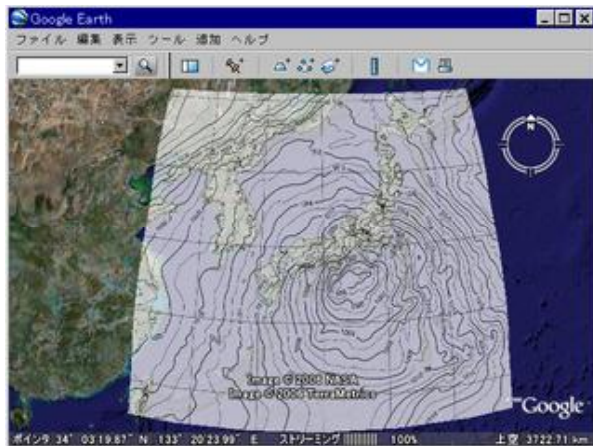
Web 上でのデータの相互運用性を改善するための枠組みとして、Linked Data が注目されている。Linked Data は、RDF (Resource Description Framework) を用いながら、実際に解決可能な URL を用いることで、データ同士を相互にリンクする試みであり、統計データや観測データなどが実際に Linked Data を利用して公開されつつある。ところが、提供されるデータのほとんどに、スキーマ情報が付随していないという問題がある。スキーマ情報は、推論や検索処理の際に有用であり、スキーマ情報を導出することは極めて有用である。そこで、本研究では、スキーマのない Linked Data に対してスキーマ情報を推測する手法を提案した。これは、共通するリソースが似た URL のパターンを共有する点に着目した手法である。実際に、クラス間の継承関係 (`rdfs:subClassOf`)、プロパティの定義域 (`rdfs:domain`) と値域 (`rdfs:range`)、同値関係 (`owl:sameAs`) が一定の精度で推定可能であることを示した。

【4】科学分野におけるデータベース応用

(主な研究費：科研費若手研究 (B))

(1) GPV/JMA アーカイブ (天笠, 北川)

地球環境研究部門と共同で、気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」 (<http://gpv.jma.ccs.hpcc.jp>) の開発、および管理、運用を行っている。GPV/JMA アーカイブは、気象庁が公開している気象予報グリッドデータ (GPV データ) を蓄積するとともに、外部登録ユーザへのデータを提供することを目的としている。GPV/JMA アーカイブで提供しているデータは、全球モデル、メソスケールモデル、リージョナルスケールモデル、週間アンサンブル、月間アンサンブル、季間アンサンブルの 6 種類である。さらに、これらのグリッドデータに加えて、数値データを元に作図した天気図を公開するとともに、天気図の閲覧性の向上するため、GoogleEarth 上に天気図をマップするための KML ファイルの公開サービスも行っている。

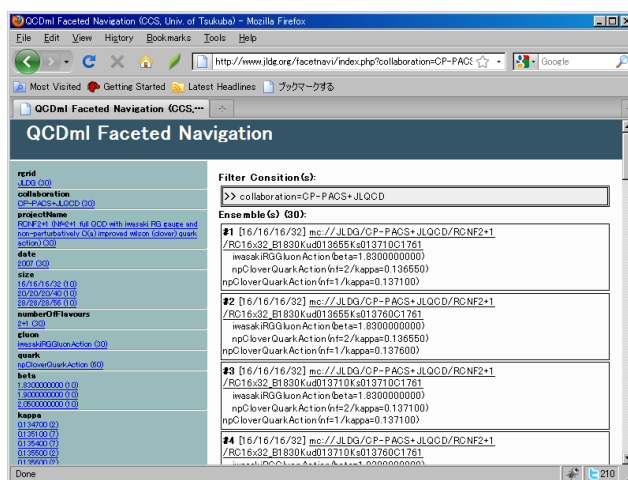


(2) 大規模衛星センサデータからのイベント検出 (川島, 北川) [P9]

GEO Grid がアーカイブしている地球観測データの中には TIR (Thermal Infrared Radiometer) と呼ばれる熱に関するデータがある。熱放射特性を利用して鉱物資源の判別や大気、地表面、海面の状態を観測することを主な目的としている。本研究では、製鉄所や火災を起きている場所など、周辺の領域より著しく温度が高い領域の検出を目的として、TIR データに基づくホットスポットの検出手法を提案した。提案手法は閾値に基づく手法と統計値に基づく手法の 2 つがある。提案手法により、製鉄所、森林火災を検出できた。

(3) 格子 QCD アンサンブル XML のファセット検索 (天笠, 北川)

ILDG (International Lattice Data Grid) では、格子 QCD 配意データのメタデータとして XML が用いられている。世界中の地域グリッドで公開されている配意データを検索するため、利用性の高いインタフェースの開発が望まれていた。このため我々は、QCDml のためのファセット検索インタフェースを設計、実装を行った。ファセット検索とは、検索対象オ



オブジェクトの集合を効率よく探索するための手法である。オブジェクトは、あらかじめファセットと呼ばれるいくつかの独立したカテゴリ毎に分類されている。各カテゴリ（ファセット）において、オブジェクトは着目する属性の値毎にグルーピングされており、その値がリスト表示されている。利用者はファセットに含まれる具体的な値を選択することで、オブジェクトの絞り込みを行い、探索を行う。XML データに対してファセット検索を適用するため、XML は半構造化性を考慮したファセットの抽出および QCDml におけるファセットの検討を行い、実際にシステムを構築した。

4. 研究業績

(1) 学術雑誌論文

- J1. 三好健文, 寺田裕太, 川島英之, 吉永努, “ストリーム処理エンジン向け動的再構成可能プロセッサアーキテクチャの設計”, 情報処理学会論文誌: データベース, Vol. 4, No. 2 (TOD50), pp. 35 - 51, 2011.
- J2. Cui Zhu, Hiroyuki Kitagawa, Spiros Papadimitriou, and Christos Faloutsos, "Outlier Detection by Example", Journal of Intelligent Information Systems, Vol. 36, No. 2, pp. 217-247, 2011.
- J3. 三好健文, 寺田裕太, 川島英之, 吉永努, “ウィンドウ結合演算子の FPGA による実現”, 電子情報通信学会論文誌通信ソサイエティスマートな社会を支えるインターネットアーキテクチャ特集号, J94-B(10), 1313-1322, 2011-10-01
- J4. 猿渡俊介, 川島英之, 高木潤一郎, 倉田成人, 森川博之, “センサデータベースマネージャにおける問合せ処理とデータ圧縮の同時最適化”, 情報処理学会論文誌「新たな展開を迎える ITS、モバイル通信とユビキタスコンピューティング」特集号, 53(1), 320-335, 2012-01-15
- J5. 山口祐人, 天笠俊之, 高橋翼, 北川博之, “情報伝搬を考慮したグラフ分析による Twitter ユーザランキング手法”, 情報処理学会論文誌データベース, Vol. 4, No. 2 (TOD50), pp. 142-157, 2011.

(2) 国際会議論文

- C1. Eli Koffi Kouassi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Probabilistic Latent Semantic Indexing using Graphics Processing Unit", Proc. International Conference on Computational Science (ICCS 2011), Singapore, pp. 382-391, June 1-3, 2011.
- C2. Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Tag-based User Topic Discovery using Twitter Lists" Proc. International Conference on Advances in Social Network Analysis and Mining

- (ASONAM 2011), Kaohsiung City, Taiwan, pp.13-20, July 25-27, 2011.
- C3. Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Fast Frequent Itemset Mining from Uncertain Database Using GPGPU", Proc. Fifth International VLDB Workshop on Management of Uncertain Data (MUD 2011), Seattle, Washington, pp. 17-24, August 29, 2011.
- C4. Kazutaka Furuse, Hiroaki Ohmura, Hanxiong Chen, and Hiroyuki Kitagawa, "An Extended Method for Finding Related Web Pages with Focused Crawling Techniques", Proc. 15th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems (KES 2011), Kaiserslautern, Germany, pp. 21-30, September 12-14, 2011.
- C5. Masafumi Oyamada, Hideyuki Kawashima, and Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Invocation of Transaction Sequences Triggered by Data Streams", The 2nd International Workshop on Streaming Media Delivery and Management Systems (SMDMS 2011), Proceedings of 3PGCIC, Barcelona, Spain, October 26-28, 2011.
- C6. Tsubasa Takahashi, Hideyuki Kawashima, and Hiroyuki Kitagawa, "A Video Manager for Relational Stream Processing Systems", The 2nd International Workshop on Streaming Media Delivery and Management Systems (SMDMS 2011), Proceedings of 3PGCIC, Barcelona, Spain, October 26-28, 2011.
- C7. Yasin Oge, Takefumi Miyoshi, Hideyuki Kawashima and Tsutomu Yoshinaga, "An Implementation of Handshake Join on FPGA", Proc. Second International Conference on Networking and Computing (ICNC 2011), Osaka, Japan, pp. 95-104, December 2011.
- C8. Takahiro KOMAMIZU, Toshiyuki AMAGASA, and Hiroyuki KITAGAWA, "A Framework of Faceted Navigation for XML Data", Proc. 13th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS2011), Ho Chi Minh City, Vietnam, pp. 28-35, December 5-7, 2011.
- C9. Jianquan Liu, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Hiroyuki Kitagawa, and Jeffrey Xu Yu, "On Efficient Distance-based Similarity Search", Proc. 11th IEEE International Conference on Data Mining (ICDM), PhD Forum, Vancouver, Canada, pp. 1199-1202, December 11-14, 2011.
- C10. Mariko Kamie, Takako Hashimoto, and Hiroyuki Kitagawa, "Effective Web Video Clustering using Playlist Information", Proc. 2012 ACM

Symposium on Applied Computing (SAC). (to appear)

- C11. Taiga Abe, Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, "An Efficient Stream Archiving Method by Operator Merge and Write Control", Proc. 5th. International Workshop on Data Management for Wireless and Pervasive Communications. (to appear)

(3) 学会発表

- P1. 小山田昌史, 川島英之, 北川博之, "ストリームに起因する連続的トランザクション呼び出しの効率化", 信学技報, vol. 111, no. 76, DE2011-2, pp. 7-12, 2011 年 6 月.
- P2. 小澤佑介, 天笠俊之, 北川博之, "GPGPU を用いた不確定データベースからの高速な頻出アイテム集合マイニング", 信学技報, vol. 111, no. 76, DE2011-9, pp. 49-54, 2011 年 6 月.
- P3. 劉健全, 陳漢雄, 北川博之, "特化した R 木空間索引を用いた効率的な逆最遠傍検索", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2012), D8-4, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P4. 駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "グラフデータに対するファセット探索のための頻出パターンを利用したオブジェクト抽出手法", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2012), D3-3, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P5. Salman Ahmed Shaikh, Hiroyuki Kitagawa, "Outlier Detection on Uncertain Data of Gaussian Distribution", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2012), D3-1, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P6. 大澤昇平, 天笠俊之, 北川博之, "RDFS Induction: URI の共通性を利用した Linked Data に対するスキーマ推定手法", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2012), E11-6, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P7. 上江まり子, 橋本隆子, 北川博之, "再生リストを利用した Web 動画クラスタリング手法の提案", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2012), F6-1, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P8. 張帆, 天笠俊之, 北川博之, 佐久間淳, "プライバシー保護オントロジーマッピングの提案", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2012), B7-6, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P9. 王春永, 川島英之, 北川博之, "衛星データからのホットスポットの抽出", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2012), A7-4, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.

- P10. 清野真奈, 天笠俊之, 北川博之, “XML ストリームに対する省電力を考慮した問合せ処理”, 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), E11-4, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P11. 山口祐人, 天笠俊之, 北川博之, "マイクロブログにおけるユーザ専門性を考慮した Web ページ推薦", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), F3-5, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P12. 小山田昌史, 川島英之, 北川博之, "ストリームデータ処理における状態一貫性の保証", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), B8-2, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P13. 小澤佑介, 天笠俊之, 北川博之, "GPU による不確実データベースからの確率的頻出アイテム集合マイニングの高速化", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), F6-5, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P14. 高橋毅, 天笠俊之, 北川博之, "レビューデータにおける評価の時系列的変化に着目したイベント検出", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), F6-2, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P15. 富山克裕, 川島英之, 北川博之, "安全性を考慮したストリームデータ処理", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), B8-5, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P16. Chongjie LI, Toshiyuki AMAGASA, Hiroyuki KITAGAWA, "Label-bag based Graph Anonymization by Edge Addition", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), B7-3, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P17. 井上寛之, 天笠俊之, 北川博之, "OLAP を利用した Linked Data の分析処理", 情報処理学会 第 74 回全国大会, 2N-2, 2012 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P18. 坂倉悠太, 天笠俊之, 北川博之, "ソーシャルブックマークにおける複数のユーザアカウントを用いた集中的ブックマークの検出", 情報処理学会 第 74 回全国大会, 3N-4, 2012 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P19. 中村高士, 早瀬康裕, 北川博之, "プロジェクト横断的なオープンソースソフトウェア開発記録の分析手法", 情報処理学会 第 74 回全国大会, 3L-9, 2012 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P20. 西村和也, 川島英之, 北川博之, "メディアストリームとタプルストリームの統合的管理に関する研究", 情報処理学会 第 74 回全国大会, 1N-7, 2012 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P21. 林史尊, 天笠俊之, 北川博之, 海老沢研, 中平聡志, "動的タイムワーピ

ング距離を用いた X 線天文データの類似検索", 情報処理学会 第 74 回全国大会, 4N-8, 2012 年 3 月 6 日～3 月 8 日.

- P22. 栗原 耕平, 川島 英之, 北川 博之, "分散ストリーム処理環境における高信頼化手法の適用とその評価", 情報処理学会 第 74 回全国大会, 1N-4, 2012 年 3 月 6 日～3 月 8 日.

(4) 受賞

- A1. 学生奨励賞, 清野真奈, 天笠俊之, 北川博之, "XML ストリームに対する省電力を考慮した問合せ処理", 第 4 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2012), E11-4, 2012 年 3 月 3 日～3 月 5 日.

(5) その他成果デモ展示

- E1. イノベーションジャパン 2011 (主催: JST, NEDO): 「リアルタイムデータ分析を支援するストリームクラウド基盤」

VII-2. 計算メディア分野

1. メンバ

教授 大田 友一

准教授 亀田 能成、北原 格

2. 概要

当グループが属する計算情報学研究部門は、「中長期的観点から計算科学の研究を抜本的に発展させる斬新な方法の開拓研究を行う部門」として、2004 年度から新しく発足した部門であり、人間社会とその環境を主な対象とする新しい計算科学の枠組みを創成し、その基盤を確立することを目標として研究活動を推進している。

人間社会を対象とする計算科学では、人間を系に含むために、計算処理の都合で時間軸を自由に変更することが出来ない。グローバルに広がる人間社会とそれを取り巻く環境(生活空間や都市環境など)を対象として、人間の時間軸(すなわち、リアルタイム)に沿って膨大な情報を処理し、実観測データとシミュレーション結果の融合情報を、人間に分かり易い形で提示し人間社会へフィードバックするためには、実世界計算情報学と呼ぶべき新しい枠組みが必要となる。

具体的には、“実世界の情報をセンシングする機能”、“膨大な情報を処理する潤沢な計算機能”、“情報を選択・蓄積する大規模データベース機能”を、コンピュータネットワーク上で融合することにより大規模知能情報メディアを構築し、そのバックボーン上で、先端的要素技術の研究開発と、ニーズに密着した応用システムの研究開発を並行して進めている。

研究成果は、研究論文や学会発表だけでなく、イノベーション・ジャパン—大学見本市において、2005 年から 2011 年まで連続で出展や技術説明会を開催するなど、広報活動にも努めてきている。

【1】自由視点映像の生成と提示:複数の視聴者が、それぞれ自由に視点を選びながら、スタジアムや体育館で行われるスポーツイベントのライブ中継を、ネットワーク経由で観ることができる技術を開発する。(主な研究費:総務省 SCOPE(大田) 2006～2008 年度、共同研究経費(大田) 2007～2009 年度、科研費若手研究A(北原) 2009～2011 年度)

【2】監視カメラ映像を活用した歩行者のための視覚支援:監視カメラ設置数の増大は避けられないであろうことを前提に、一般市民が監視カメラから得るメリットとして、眼に見えて便利さを実感できる新しい付加価値の在り方を提案し、それを実現する基盤技術を創成する。(主な研究費:科研費基盤研究A(大田)2005～2009 年度)

【3】モバイルカメラと環境カメラを補間的に利用する映像監視技術:環境カメラ映像とモバイルカメラ映像の特長を統合した次世代の監視映像技術に関する研究開発をする。(主な研究費:科研費若手研究A(北原)2006～2008 年度)

【4】環境カメラ映像からの複数動作分類:日常空間内に配置した環境カメラを用いて、対象空間内の物体行動を自動認識させる研究をする。その一環として、環境カメラ映像に適した画像特徴量である CHLAC 特徴量を用いることで、様々な物体の複数動作を一括して認識する方法の実現を目標としてい

る。(主な研究費:科研費若手研究A(亀田)2004～2006 年度, 科研費基盤 B(亀田)2011～2014 年度)

【5】インタビュー対象者の心理的変動を計測するための基盤技術:入国審査やセキュリティチェックポイントで、定型的なインタビューなどを通して害意を持った対象者をスクリーニングすることは重要な社会基盤技術である。審査官などのインタビューは相手の僅かな動きや反応の違いから経験的に害意保有者を見抜くとされる。現在の技術レベルではまだ対象者の心理的変動を確実に認識することは難しいが、本研究では、それに向けた基盤技術を研究する。

【6】TRAKMARK・拡張現実感におけるカメラキャリブレーション性能評価のためのベンチマーク:拡張現実感や複合の研究デモンストレーションにおいて、世界に対するカメラキャリブレーションの性能は、生成される合成映像の品質に直結する重要な値である。本研究では、学術的な観点から、動的なカメラキャリブレーション手法についてその性能評価のためのベンチマークを確立することを目指す。そのために、データと性能評価手順の両面について研究を進める。

3. 研究成果

【1】自由視点映像の生成と提示 (大田, 亀田, 北原)

国立スポーツ科学センターとの共同研究として、総務省戦略的情報通信研究開発推進制度(SCOPE)による特定領域重点型研究開発「ネットワークによる自由視点映像のライブ配信とインタラクティブ提示」(研究代表者 大田友一)を 2004 年度から 2006 年度の 3 年間に渡り実施した。以降も、日本電気株式会社との共同研究や、2009 年度からは科研費若手研究A「閲覧者中心型自由視点映像コンテンツ生成技術」として、研究開発を継続している。

この研究は、複数の視聴者が自由に視点を選びながらスタジアムや体育館で行われるスポーツイベントのライブ中継をネットワーク経由で観ることができる技術や、直感的な自由視点映像の撮影・提示手法の開発、及び、提示映像の高品質化により、次世代コンテンツ技術を創出することを目的としている。

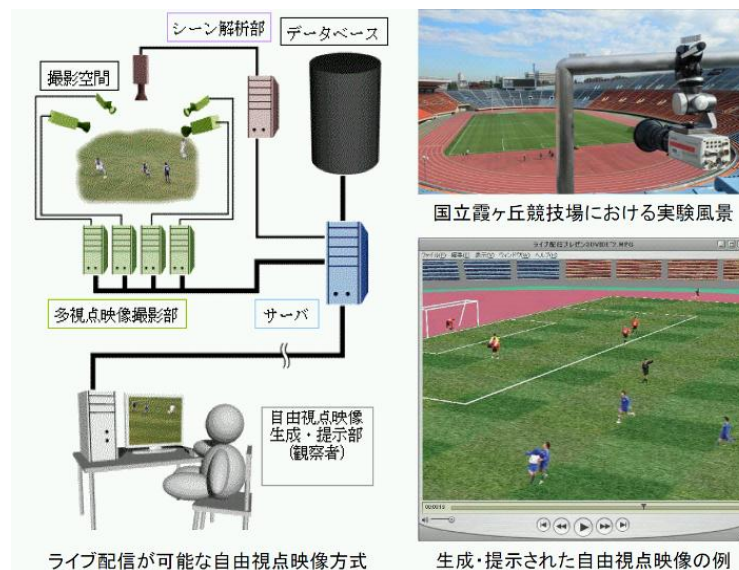


図 1: 自由視点映像提示のフレームワーク

撮影物体を1枚の板(ポリゴン)とその表面に貼り付けるテクスチャ情報で表現する“人物ビルボード”という手法を開発することにより、多視点映像の撮影・加工・伝送から自由視点映像の生成・提示までの全ての処理をビデオレートで処理する世界初の自由視点映像のライブ配信を実現した。さらに、自由視点映像技術を実験室やスタジオから開放することを目指し、国立競技場や代々木体育館における実証実験において、システム全体の実用性・汎用性・ロバスト性の向上を目的とした技術開発を推進することにより、世界でも他に例を見ない、大規模空間で実施されるイベントを対象とした自由視点映像ライブ配信の実現に成功した。

2011 年度に顕著な進捗があったと認められる研究課題としては、自由視点映像の撮影・提示方式が挙げられる。図 2 に示すように、両手を用いて3次元的にカメラの位置・姿勢を入力することにより、身体性を活用した直感的な操作が可能となる。カメラ操作を行うスペースの下方に、撮影シーンの状況を表すアイコンを重畳した俯瞰映像を提示することにより、状況に応じた被写体と仮想カメラの適切な位置関係の把握が容易となり、正確なカメラ操作が実現される。

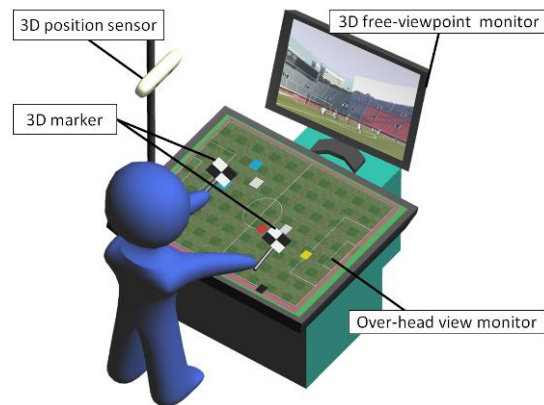


図 2：提案する自由視点映像の撮影・提示方式

提案手法の特性を明らかにするために、図 3 に示すパイロットシステムを実装し、マウスを用いる方法と Eyeball-in-hand メタファを用いる方法の2種類の仮想カメラ操作インタフェースとの比較実験を行う。マウスインタフェースとの比較では、俯瞰映像の有無により、検索性能や追跡性能にどのように差が出るのかを検証する。仮想カメラ操作方式との比較では、両手で仮想カメラの視点位置・注視点位置を個別に操作することの影響を検証する。検索性能の比較実験では、シーン状況を可視化するフィールド俯瞰映像により、注目対象を見失った状況でも、注目対象を正確に再補足できることが確認された。追跡性能の比較実験では、両手を用いて視点位置と注視点位置を同時に指定することにより、直感的に移動人物の追跡撮影が可能なが確認された。

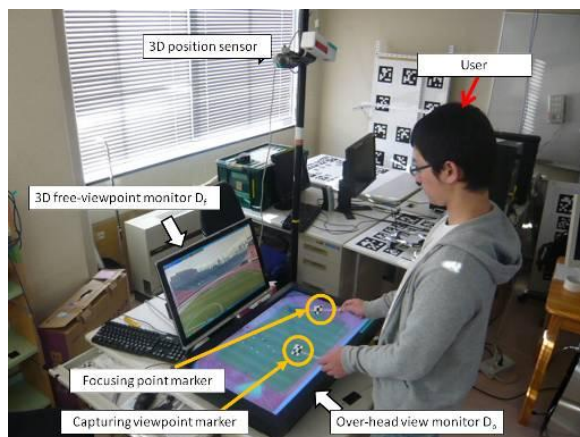


図 3：提案手法を実装したパイロットシステム

【2】監視カメラ映像を活用する視覚支援方式（大田、亀田、北原）

2006 年度から 2009 年度の 4 年間の計画で、科学研究費補助金・基盤研究(A)「シースルービジョン：監視カメラ映像を活用する歩行者のための視覚支援方式の開発」（研究代表者 大田友一）を実施した。

本研究は、公共空間における監視カメラ設置数の増大は避けられないであろうことを前提に、一般市民が、自らのプライバシーと引き替えに監視カメラから得られるメリットとして、「安全」という重要だが眼に見えにくい価値の他に、眼に見えて便利さを実感できる新しい付加価値の在り方を提案し、それを実現する基盤技術を創成することを目的としている。新しい付加価値の在り方として、具体的には、従来、カメラの設置者のみが利用していた監視カメラ映像を、被写体である一般市民も利用可能とすることを前提に、歩行者が手にする携帯型情報端末に監視カメラ映像を適切に加工して提示し、自分の眼では直接見ることができない視覚情報を提供する「シースルービジョン」を提案した。

2011 年度は、図 4 に示す、これまで開発してきた、広域屋外環境において注目位置 (POI) の指示共有を行うためのバーチャルジオラマ (VD) インタフェースについて、指示位置のわかりやすさに関する評価実験に取り組んだ。具体的には、図 5 に示すような VD モデル上に表示された POI が観察しやすい VD モデルの操作・表示方式をユーザ実験により評価した。VD モデル配置のための操作方式として、タッチパネルのドラッグによる手動操作のみで行う Free shot 方式 (図 6 右) と、モバイル端末姿勢に合わせた自動的な再配置を併用する Dolly-round/Crane (D/C) shot 方式 (図 6 左) を取り上げた。VD モデルと実写映像との併用による表示方式に関しては、一般的なビデオシースルー型の MR システムで採用されている、モバイル端末のカメラで撮影した実写映像に VD モデルを重畳表示する方式の是非を検証した。

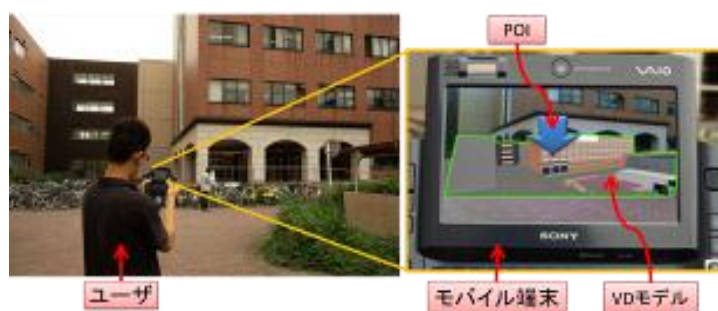


図 4：バーチャルジオラマインタフェースのコンセプト

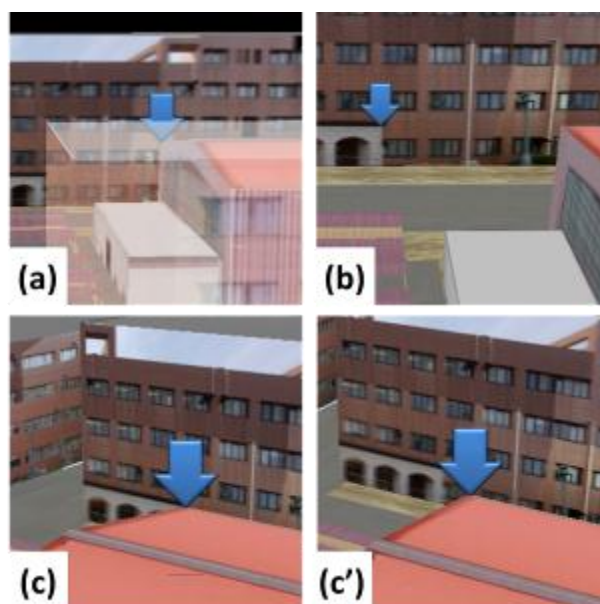


図 5：VD モデル上の矢印による POI の表示例

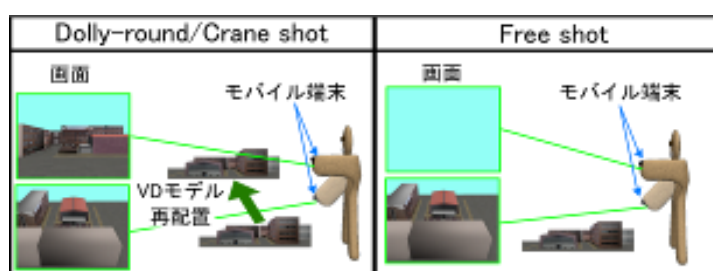


図 6：Dolly-round/Crane shot 方式と Free shot 方式

ユーザ実験の結果、大半の被験者が D/C shot 方式を好んだ。また、建物が密集している地点において D/C shot 方式は、POI が示す位置を見つけるのに要する時間の増加量を減らし、タッチパネルによるアンカーポイントの水平移動操作の増加を抑えることが確認された。この結果より、D/C shot 方式は、Free shot 方式に比べバーチャルジオラマインタフェースの使いやすさの点で優れていると考えられる。

一方、実写映像上へ VD モデルを重畳表示する方式については、POI が示す位置を見つけるのに要

する時間への有意な影響は見られず、被験者らの印象評価にもばらつきが見られた。この結果から、VD モデルと実写映像との併用による表示方式はユーザビリティを改善するとは限らず、実写映像の見やすさに注意したインタフェース設計の必要性が確認された。今回の被験者らは、実験環境を熟知していたため、今後は実験環境に関する予備知識を持たない被験者による追加実験が必要である。我々は、実写映像とVDモデルの画面中に占める面積比などを考慮するなど、より注意深くインタフェースをデザインすることにより、POI が観察しやすいVD モデル重畳表示の実現が可能性であると考えている。

【3】モバイルカメラと環境カメラを補間的に利用する映像監視技術(北原、大田)

2006 年度から 2008 年度の 3 年間の計画で、科学研究費補助金・若手研究 A「被写体のプライバシーを考慮したモバイルカメラによる高自由度映像監視技術に関する研究」(研究代表者 北原格)を実施した。以降も、科研費若手研究 A「閲覧者中心型自由視点映像コンテンツ生成技術」の基盤技術の一部として、研究開発を継続している。

この研究では、環境に設置された多視点カメラとモバイルカメラを連動させることにより、互いの長所を融合した撮影システムを構築し、モバイルカメラのキャリブレーション技術や、モバイルカメラによって収集された映像情報を用いて環境設置型カメラの監視エリアを拡大する技術の研究開発を行っている。

2011 年度は、前年度に開発したモバイルカメラの位置・姿勢を推定する技術を用いたアプリケーション(MR スナップショット)の開発に取り組んだ。これは、モバイルカメラを用いて撮影したスナップ写真に対して、複合現実感を実現するもので、撮影環境中に設置したデプスカメラから得られる 3 次元情報を用いて、モバイルカメラの位置・姿勢を推定する処理に加え、実物体と仮想物体間の正確な隠蔽関係表現する手法により実現されるものである。本手法は、図 7 に示すように、環境デプスカメラから得られる時系列デプス情報を参照することにより、動的に見え方が変化するシーンへの対応が可能である。また、隠蔽表現を行う際、デプス情報を用いた奥行判定と画像の色情報に基づく領域分割処理を組み合わせることにより、実物体と仮想物体の正確な隠蔽関係表現を実現する。



図 7：環境デプスカメラを用いた時系列データベースの取得

図 8 に示すように、デプスマップからシーンの 3 次元情報を復元し、環境カメラ画像中から自然特徴点を検出することで、自然特徴点の 3D-map を構築する。画像特徴を用いて対応付け処理によって獲得される、3D-map 中の特徴点の 3 次元座標値とモバイルカメラ画像上における観測位置(2次元座標値)の組み合わせ情報から、モバイルカメラの位置姿勢を推定する。本研究では、自然特徴点の画像

上での見え方を表す特徴量として、環境デプスカメラとモバイルカメラの視点の違いや解像度などの撮像特性の違いを考慮し、スケール変化や照明変動に頑健な SURF を利用する。

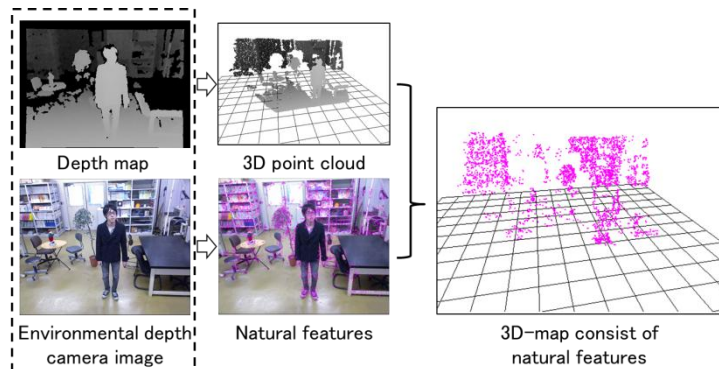


図 8: 3D-map の構築

複合現実型提示における隠蔽関係を再現するためには、実物体と仮想物体の奥行き情報を比較して、仮想物体を描画する領域を決定(分割)する必要があります。本研究では、環境デプスカメラの情報からモバイルカメラ視点におけるデプスマップを生成し、画素ごとに実物体と仮想物体の奥行きを比較する。これだけでは、図9に示すように、物体の輪郭部分において奥行き推定誤差の影響による分割誤りが発生するため、カラー情報を用いた領域分割法である GrabCut を併用し、領域分割精度を向上させる。



図 9: 隠蔽関係の表現: デプスの比較のみ (左)、GrabCut 適用後 (右)

【4】環境カメラ映像からの複数動作分類 (亀田、大田)

本研究については、2004 年度から 2006 年度の 3 年間の計画による科学研究費補助金・若手研究A「ネットワーク結合型マルチメディアセンサアレイ群の自動協調」(研究代表者 亀田能成)で研究を開始し、現在は 2011 年度から 2015 年度の 4 年間の計画による科学研究費補助金・基盤研究B「環境カメラ群映像の安心かつ効率的に見える化の為の時空間解析と複合現実感的可視化」に引き継がれている。

研究テーマは、日常空間内に配置した環境カメラによって対象空間内の物体行動を自動認識させることであり、これは計算メディアとしての映像を信号レベルから記号レベルまで変換する重要な処理であ

る。

2011 年度は、前年度提案した、映像に対するコンパクトな特徴量表現として現在注目されている CHLAC 特徴量をもとに様々な物体の動作を分類する方法の有効性を検証した。

提案手法は、複数の物体がそれぞれ別の動作をしているような状況でも対応可能な新規のアプローチを採っており、その意味では既存の手法と直接比較することは難しいが、それでも何らかの方法で従来法に対する性能評価を示すことが望まれる。そこで、比較対象として、近年、一般画像認識ないし映像認識で用いられている、微分フィルタベースの局所特徴量表現にマルチクラスの高次元ベクトル識別器を組み合わせた方法を選び、実際の人間の動作を対象として評価実験を行った。なお、この対照手法については、具体的には、微分フィルタベースの局所特徴量表現としては CHLAC と同じく時空間的な局所表現が得られる Laptiv らの手法を採用し、マルチクラス識別器には多くの実績があるマルチクラス SVM(Multi-SVM)を使用した。実験の結果、提案手法のほうが Laptiv+Multi-SVM 手法よりも認識率が高くなることが示せた。

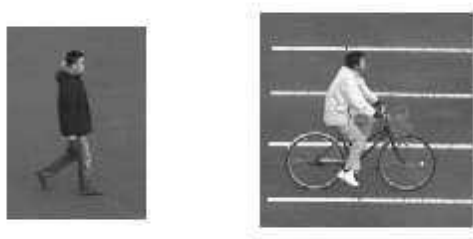


図 10: 比較実験に用いた人物動作の例(「左向歩行」と「左向自転車移動」)

【5】インタビュー対象者の心理的変動を計測するための基盤技術(亀田、大田)

本研究でいうインタビューとは、質問者が被験者に対して直接問いかけを行っている状況を指し、そのインタビュー中に示される被験者の僅かな動きからその心理的変動を計測するのが本研究の大きな目標である。研究上の最終目標は、対象人物が悪意(害意)を潜在的に有しているかどうかを判定することであり、世界的にも成功例が未だに報告されていない野心的な挑戦である。本研究で成果を挙げることができれば、テロ犯罪防止・抑制が容易になり、安心安全な社会の構築に貢献できる。

本研究では、入国審査やセキュリティチェックポイントで行われる定型的なインタビューなどを通して害意を持った対象者をスクリーニングする基盤技術について取り組んでいる。審査官などのインタビューは相手の僅かな動きや反応の違いから経験的に害意保有者を見抜くとされ、現在の技術レベルではまだ対象者の心理的変動を確実に認識することは難しい。そのため、現在本研究では、インタビューの判断を支援するためのデータ解析の理論構築に向けて研究を進めている。

工学的および心理学的な検討から、我々は、Micro Expression と呼ばれる極めて短時間の表情露出、上体の動き、瞳孔及び目の動き、体表面の温度変化の4つを通じて、インタビューにおける対象者の心理的変動が非接触でも観測することが可能と予想している。特に Micro Expression は長くとも数百ミリ秒

しか続かないため、我々の予想を検証するためには、ミリ秒オーダーで正確に同期されたマルチモーダルセンシング記録が必要となる。2011 年度は、このマルチモーダルセンシングについて、200fps の可視光高速撮影カメラとサーマルイメージャーとをミリ秒オーダーの正確さで記録できる技術を実現するとともに、可視光画像とサーマル画像という性質の全く異なる2種類の画像間でキャリブレーションを正確に行う技術を確立した。

これによって、今後、定型的なインタビューについて、様々な文化的差異を幅広く含んだ精密なマルチモーダルデータベースを構築していく予定であり、そのため、我々の研究グループでは、米国を含む多国間でこの目的のためのグラウンドトゥールズ(真値)付きDB構築の方法論を策定している。

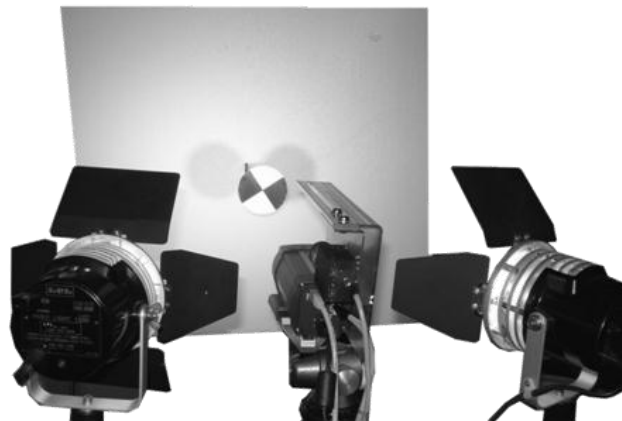


図 11: 高速度撮影カメラとサーマルイメージャーとの同期撮影の様子(中央がカメラ部、左右は照明装置)

【6】TRAKMARK・拡張現実感におけるカメラキャリブレーション性能評価のためのベンチマーク

拡張現実感や複合の研究デモンストレーションにおいて、世界に対するカメラキャリブレーションの性能は、生成される合成映像の品質に直結する重要な値である。本研究では、他大学・研究機関と連携し、学術的な観点から、動的なカメラキャリブレーション手法についてその性能評価のためのベンチマークを確立することを目指す。そのために、データと性能評価手順の両面について研究を進めている。

データに関しては、2011 年度に、TRAKMARK グループとして性能評価のためのベンチマークを正式にリリースした。

性能評価方法については、ハードウェアレイヤを切り離し、OSも含めたソフトウェアレイヤを全てパッケージ化して提供することで、拡張現実感や複合の研究デモンストレーションにおいて、同一のハードウェア条件であればパフォーマンス実施を保証できる Linux ベースのソフトウェア環境提供の枠組みを提案した。これは、デバイスドライバから OS、その上 AR/MR デモンストレーションを含むアプリケーションプログラム層に至るまで全てのソフトウェアを一つの USB メモリに収め、それに依ってのみシステムを稼働させる枠組を用いることで実現される。我々はこの枠組みを Casper cartridge と呼んでいる。これにより、ターゲットとなる AR/MR システムについて、USB ブート可能な同一構成のハードウェアさえ用意すれば、USB メモリを挿して起動するだけで同一のパフォーマンスを示すことができる再現性(完全性)を保証す

ることができる。Casper Cartridge にはさら3つの重要な利点がある。一つめは USB ブート可能なハードウェアに対して USB メモリを挿して起動するだけでターゲットとなる AR/MR デモンストレーションが利用可能になる利便性、二つめは AR/MR の開発環境再配布の容易性、三つめは再配布を受けた利用者側が本環境上で開発さらに継続できる発展性である。そのため、本提案はシステムの正当な評価を望む先端的な研究者だけでなく、AR/MR 研究の入口に立つ学生や研究者にとっても大きな福音となる。

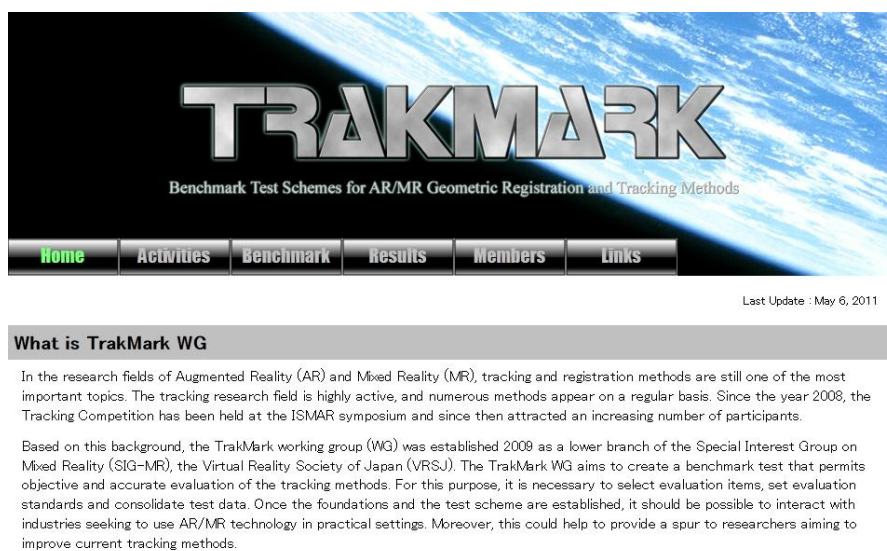


図 12: TRAKMARK の web site (www.trakmark.net)

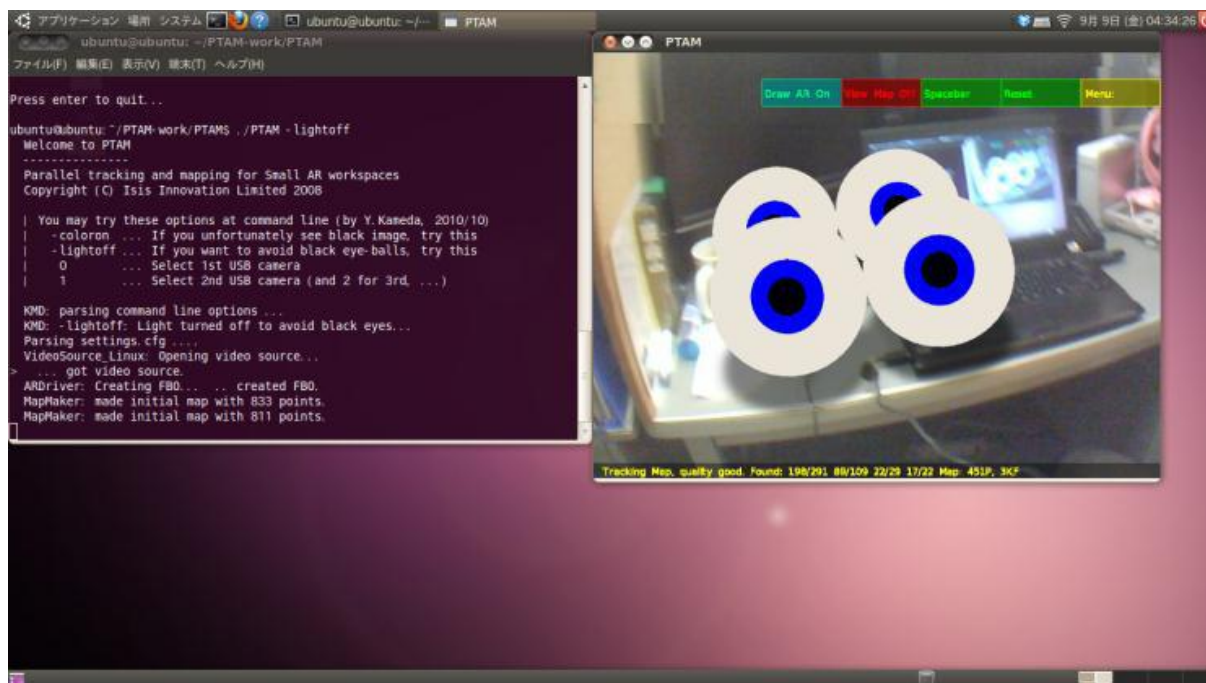


図 12: Casper Cartridge によるベンチマーク実行環境の構築

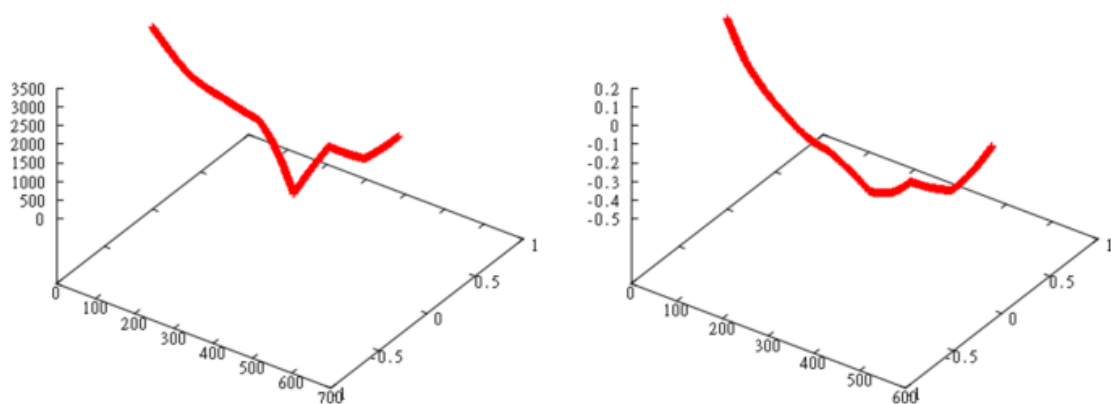


図 13: カメラトラッキング精度の空間軌跡による検証例 (左: 真値、右: レファレンスプログラム出力)

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. 岡本祐樹, 北原格, 大田友一

遠隔協調型複合現実感における作業空間表現のための立体人物像提示

電子情報通信学会論文誌 D, Vol.J94-D, No.5, pp.830-838, 2011

2. 佐藤 竜太, 亀田 能成, 大田 友一

CHLAC 特徴量の錐制約部分空間表現による動作分類

電子情報通信学会論文誌 D, vol.J95-D, no.3, pp.645-655, 2012

3. 渡邊 哲哉, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一

正確で直感的なカメラ操作を可能とする両手を用いた自由視点映像撮影インタフェース

電子情報通信学会論文誌 D, vol.J95-D, no.3, pp.687-696, 2012.

4. 林 将之, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一

広域屋外環境における複合現実型バーチャルジオラマインタフェースの評価

日本バーチャルリアリティ学会論文誌, vol.16, no.2, pp.215-225, 2011.

5. Masayuki Hayashi, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

A User Study on Viewpoint Manipulation Methods for Diorama-Based Interface Utilizing Mobile Device Pose in Outdoor Environment

Proceedings of 21st International Conference on Artificial Reality and Telexistence (ICAT2011), 6 pages, 2011.

6. Senya Polikovsky, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

Evaluation of Synchronization Accuracy Between High Speed Cameras in Infrared and Visible Spectrums

Proceedings of IAPR Conference on Machine Vision Applications (MVA2011), pp.51-54, 2011.

7. Takeshi Kurata, Masakatsu Kourogi, Tomoya Ishikawa, Yoshinari Kameda, Kyota Aoki, and Jun Ishikawa

Indoor-Outdoor Navigation System for Visually-Impaired Pedestrians: Preliminary Evaluation of Position Measurement and Obstacle Display

The Fifteenth International Symposium on Wearable Computing, 2 pages, 2011.

(2) 学会発表

(A)招待講演

1. 北原 格

仮想化現実技術を用いた拡張現実感の新展開

大阪電気通信大学 情報学研究施設 視覚情報学講演会(2011 年 12 月 2 日)

(B)その他の学会発表

1. Senya Polikovsky, Alejandra Quiros, Yoshinari Kameda, Judee Burgoon, and Yuichi Ohta

Multisensory Video Database of Physiological and Behavioral Responses

Israel Machine Vision Conference and Exhibition 2012, poster, 2012.

2. Masayuki Hayashi, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

A Study of Camera Tracking Evaluation on Trakmark Data-Set

Proceedings of "The 2nd International Workshop on AR/MR Registration, Tracking and Benchmarking" Workshop in conjunction with ISMAR11, 5 pages, 2011.

3. 上田 将司, 北原 格, 大田 友一

フリーハンド映像から抽出した壁領域における複合現実型壁紙シミュレーション

電子情報通信学会 信学技報, vol. 111, no. 380, MVE2011-78, pp. 233-238, 2012.

4. 水流 弘達, 北原 格, 大田 友一

環境に設置したステレオカメラを用いたモバイルカメラの位置・姿勢推定法

電子情報通信学会 信学技報, vol. 111, no. 235, MVE2011-34, pp. 17-22, 2011.

5. 徳本 晋之介, 北原 格, 大田 友一

ジオラマモデルを用いてデザインした舞台照明の複合現実型提示

電子情報通信学会 信学技報, vol. 111, no. 235, MVE2011-35, pp. 23-28, 2011.

6. 穴戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成,
パーティクルフィルタとカルマンフィルタを補完的に利用したバドミントン映像からのシャトル軌道推定
動的画像処理実利用化ワークショップ(DIA)2012, 6 pages, 2012.
7. 亀田 能成
ハイビジョン講義アーカイブを中心とした E-learning 環境の構築
HCG シンポジウム 2011, pp.10-13, 2011.
8. 林 将之, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一
AR/MR デモンストレーションの再現性を保証するソフトウェア環境の構築—Casper Cartridge プロジェクト—
電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.111, no.235, pp.103-108, 2011.
9. 湯瀬 裕昭, 石川 准, 青山 知靖, 亀田 能成, 青木 恭太, 村山 慎二郎, 蔵田 武志, 興梠 正克, 石川 智也
画像・GPS 等のセンサ統合による屋内外視覚障害者歩行支援システムの評価
マルチメディア, 分散, 協調とモバイル(DICOMO2011)シンポジウム, pp.1080-1083, 2011.
10. 田邊 健, 北原 格, 亀田 能成,
入口での多方向撮影を利用した駐車場における車両追跡
電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), p.190, 2012.
11. 林 将之, 北原 格, 亀田 能成,
屋外におけるジオラマ型インタフェースを用いたパン・チルトカメラの可視化
電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), p.180, 2012.
12. 清水 諒, 北原 格, 亀田 能成,
遠方の景観を昼間の映像で表現した複合現実型夜間映像提示
電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), p.179, 2012.
13. 佐藤 秀昭, 北原 格, 大田 友一,
仮想鏡像の運動視差提示遅れによる奥行知覚精度の計測手法
電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), p.178, 2012.
14. 山桐 靖史, 北原 格, 亀田 能成,
ユーザの身体動作を用いた自由視点映像閲覧インタフェースの検討
電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), p.134, 2012.
15. 柏熊 淳也, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一

マルチタッチ操作を用いた自由視点映像閲覧法の検討

日本バーチャルリアリティ学会第 16 回大会論文集, 4 pages, 2011.

2011 年 9 月 20 日～22 日, はこだて未来大学にて発表

16. 西川 康之, 北原 格, 大田 友一

複合現実感を用いたカメラトラッキング支援手法

第16回日本バーチャルリアリティ学会大会, 13D-4, 2011 年 9 月.

17. 上田 将司, 北原 格, 大田 友一

動画像上での複合現実感を用いた壁紙変更手法

第16回日本バーチャルリアリティ学会大会, 21C-5, 2011 年 9 月.

18. Nozomu Kasuya, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

Semi-Realistic View Generation of a Player in Soccer Match

The Fourth Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR11), (slides), 2011.

19. Hiroyoshi Tsuru, Itaru Kitahara, and Yuichi Ohta

A Pose Estimation Method of a Mobile Camera by Using an Environmental Stereo Camera

18th Korea-Japan Joint Workshop on Frontiers of Computer Vision, 2011.

(B)その他記事等

1. 亀田 能成

マーカースAR

映像情報メディア学会学会誌, vol.66, no.1, pp.45-51, 2012.

5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

2011年度は下記のイベント・展示会に参加し、広く社会に研究成果を広報した。

また、2011年度も引き続き（株）日本電気と共同研究を実施した。

大学院専攻研究公開（展示）

日時：2011.5.7, 2010.6.4 (いずれも10:00-16:00)

会場：筑波大学第三エリア

展示内容：自由視点映像や複合現実感技術に関連したデモシステムの展示、技術紹介ビデオの紹介

イノベーション・ジャパン**2011** (新技術説明会)

開催日 : 2011.9.21-22

会場 : 東京国際フォーラム

- ・説明会番号I-06 (害意検出のための高精度マルチモーダルDB構築)
- ・テーマ名 : 直感的閲覧が可能な 3 次元自由視点映像ブラウザ

Demonstration at the Sixth IEEE and ACM International Symposium on Mixed and Augmented Reality
(ISMAR2011)

日時:2011.10.27-28

場所:ISMAR2011 会場 (Basel, Switzerland)

著者:Masayuki Hayashi, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

題目:A Ready-To-Use USB Memory Stick for TRAKMARK Evaluation and AR Learning